Laboratoire National Henri Becquerel
LNE-LNHB

NOTE TECHNIQUE

Référence de la note	LNHB 2008/45

TITRE : Logiciel d'ajustement des courbes de rendement AÇORES

RESUME : Cette note présente le nouveau logiciel AÇORES utilisé pour l'ajustement des courbes de rendement en fonction de l'énergie pour les spectromètres gamma et X.
Le meilleur ajustement est obtenu en minimisant le $\chi 2$ en tenant compte des corrélations entre les données d'entrée (couples de valeurs : énergie, rendement) et en utilisant une méthode de résolution matricielle. Un outil de visualisation permet de suivre la qualité de l'ajustement et, éventuellement, de modifier les données d'entrée et les paramètres de l'ajustement.
Les résultats obtenus avec ce nouveau logiciel sont comparés aux valeurs calculées avec le logiciel utilisé jusqu'à présent au laboratoire. Les écarts observés ne sont pas significatifs, ce qui permet de valider AÇORES pour une utilisation en routine pour la spectrométrie de photons au LNHB.

IND.	DATE	OBJET
A	21/04/2008	Emission initiale

	Auteur(s)	Vérificateur(s)	Chef de laboratoire	Chef du Service
Noms	M.C. Lépy, L. Ferreux, C. Hamon, J. Plagnard	C. Dulieu	E. Verdeau	F. Damoy
Dates	05/05/2008	09/05/2008	13/5/2008	14-5-08
Signatures				

Table des matières

1. Introduction 3

2. Rendement d'absorption totale d'un détecteur 3
2.1 Détermination expérimentale du rendement d'un détecteur 3
2.2 Interpolation des valeurs expérimentales 4

3. Procédure d'ajustement des courbes de rendement 4
3.1 Principe 4
3.2 Notation matricielle 5
3.3 Résolution 5
3.4 Matrice des covariances 6
3.5 Expression des incertitudes selon la fonction d'ajustement 7
3.5.1 Incertitudes sur les données d'entrée 7
3.5.2 Incertitude sur les résultats 7
3.6 Calcul du rendement pour des énergies différentes des données d'entrée 8

4. Validation du logiciel AÇORES 8
4.1 Comparaison avec EFFIGIE 8
4.2 Changement de base des logarithmes 12
4.3 Prise en compte des corrélations entre les données d'entrée 14
4.4 Résultats obtenus pour l'exercice GAM83 15

5. Utilisation pratique du logiciel AÇORES 18
5.1 Lecture du fichier d'entrée 19
5.2 Affichage des valeurs expérimentales 19
5.3 Ajustement 20
5.4 Ficher de sortie 21

6. Conclusion 22

7. Références 23

Annexe : Manuel d'utilisation 24

1. Introduction

L'analyse par spectrométrie gamma repose sur l'étude des pics d'absorption totale observés dans le spectre enregistré suite à la mesure d'un radionucléide. La relation entre le nombre d'impulsions enregistrées dans un pic et l'activité du radionucléide émettant les photons d'énergie correspondante nécessite la connaissance du rendement d'absorption totale pour cette énergie, dans les conditions géométriques de la mesure. L'étalonnage expérimental en rendement conduit à des couples de valeurs discrètes (E, R_P(E)). Le rendement pour des énergies intermédiaires s'obtient par interpolation entre ces valeurs. Pour effectuer celle-ci, la méthode la plus répandue consiste à ajuster une fonction mathématique pour représenter l'évolution du rendement en fonction de l'énergie, f(E).
Le LNHB dispose d'un logiciel maison, nommé EFFIGIE, qui est couramment utilisé pour l'étalonnage des spectromètres gamma, dans une version datant de 1996 [1]. Ce logiciel est écrit en FORTRAN et les résultats sont enregistrés directement dans un fichier de sortie. Les résultats ne sont donc pas contrôlables et, si l'on souhaite modifier une donnée, il est nécessaire de relancer le programme.
Nous avons donc souhaité faire évoluer ce logiciel et, en particulier, implémenter un outil de visualisation afin de vérifier au fur et à mesure la qualité de l'ajustement. Le nouveau programme, appelé AÇORES (Ajustement des COurbes de REndement pour la Spectrométrie), a donc été conçu sous environnement Windows®. Il dispose de fonctionnalités permettant de visualiser les points expérimentaux et le résultat des ajustements ainsi que les résidus. Ce contrôle visuel permet à l'utilisateur de juger de la qualité de l'ajustement et, si besoin, de modifier les données d'entrée ou la fonction d'ajustement.

2. Rendement d'absorption totale d'un détecteur

2.1 Détermination expérimentale du rendement d'un détecteur

Le nombre d'impulsions recueillies dans un pic correspondant à une énergie *E* (pic d'absorption totale) est proportionnel au nombre de photons d'énergie *E* émis par le radionucléide et au rendement d'absorption totale du détecteur pour cette même énergie *E* :

$$N_{net}(E) = A \cdot I(E) \cdot R_P(E) \cdot \prod_i C_i \qquad \text{[Eq. 1]}$$

$N_{net}(E)$	Taux de comptage net enregistré sous le pic correspondant à la transition d'énergie E (s^{-1}),
A	Activité du radionucléide étalon (exprimée en becquerels),
$I(E)$	Intensité d'émission de la raie d'énergie E,
$R_p(E)$	Rendement d'absorption totale du détecteur à l'énergie E considérée,
ΠC_i	Produit de facteurs correctifs inhérents aux conditions de mesure :

- correction de décroissance,
- pertes de comptage par coïncidences,
- correction d'atténuation et d'auto-absorption,
- correction de pertes de comptage par effets d'empilement et de temps mort,
- correction de géométrie.

Inversement, le rendement d'absorption totale est déterminé à partir de sources d'activité connue :

$$R_P(E) = \frac{N_{net}(E)}{A \cdot I(E) \cdot \prod_i C_i} \qquad \text{[Eq. 2]}$$

L'utilisation de différentes sources émettant des photons d'énergie *Ei*, permet donc d'obtenir un jeu de valeurs expérimentales discrètes du rendement $R_P(Ei)$, valables pour une géométrie source-détecteur donnée.

2.2 Interpolation des valeurs expérimentales

Afin de calculer le rendement pour une énergie quelconque, une fonction mathématique peut être ajustée aux valeurs expérimentales :

$$R_P(E) = f(E) \qquad \text{[Eq. 3]}$$

Remarque : dans la suite de ce rapport, le terme « rendement », R, sera utilisé à la place de « rendement d'absorption totale », R_P.

Pour des raisons pratiques, l'ajustement est réalisé sur le logarithme du rendement (qui varie de façon plus monotone que le rendement brut) et deux fonctions, « Apolog » et « Apocope », sont généralement utilisées pour ces ajustements : il s'agit d'expressions polynomiales fonction du logarithme de l'énergie ou de son inverse :

$$\text{APOLOG :} \quad log(R) = \sum_{k=1}^{P} a_k \cdot (log(E))^{k-1} \qquad \text{[Eq. 4]}$$

$$\text{APOCOPE :} \quad log(R) = \sum_{k=1}^{P} a_k \cdot \left(\frac{1}{E}\right)^{k-1} = \sum_{k=1}^{P} a_k \cdot (E)^{1-k} \qquad \text{[Eq. 5]}$$

3. Procédure d'ajustement des courbes de rendement

3.1 Principe

L'ajustement d'une fonction mathématique aux valeurs expérimentales du rendement s'effectue par la méthode des moindres carrés [2-5].

Disposant d'un ensemble de N données (*X* (énergie), *Y*(rendement)), on cherche la fonction :

$$Y(x) = \sum_{k=1}^{P} a_k \cdot X^{k-1}(x) \qquad \text{[Eq. 6]}$$

qui s'ajustera au mieux aux N points expérimentaux.

Ici, $X = log(E)$ ou $1/E$
et $Y = log(R)$

L'ajustement est optimal lorsque la somme des carrés des écarts entre la fonction d'ajustement et les valeurs expérimentales est minimum, c'est-à-dire lorsque :

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{Y_i - \sum_{k=1}^{P} a_k \cdot X^{k-1}(x)}{\sigma_i} \right]^2 \qquad \text{[Eq. 7]}$$

est minimum.

Les a_k correspondent à P coefficients à optimiser, et σ_i est l'incertitude (écart-type) associée au $i^{ème}$ point expérimental.

3.2 Notation matricielle

Soit **A** la matrice de dimensions N x P définie par :

$$A_{ij} = X^{j-1}(x_i) \qquad \text{[Eq. 8]}$$

Remarque : on doit avoir N > P, c'est-à-dire que le nombre de points expérimentaux doit être notablement plus grand que le degré de la fonction d'ajustement.

Soit **b** le vecteur de dimension N tel que :

$$b_i = y_i \qquad \text{[Eq. 9]}$$

Soit **a** le vecteur de dimension P dont les composants sont les paramètres à ajuster :

$$\mathbf{a} = (a_1, a_2, \ldots a_p)$$

La matrice des covariances (dimensions N x N) est donnée par :

$$V_{i,j} = V_{Log(Ri),Log(Rj)} = \frac{cov(R_i, R_j)}{R_i \cdot R_j} \qquad \text{[Eq. 10]}$$

3.3 Résolution

Le minimum de χ^2 est obtenu lorsque toutes ses dérivées partielles s'annulent, soit :

$$0 = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2} \left[Y_i - \sum_{\upsilon=1}^{P} a_\upsilon \cdot X^{\upsilon-1}(x) \right] \cdot X^{k-1}(x) \qquad k = 1, \ldots, P \qquad \text{[Eq. 11]}$$

Ce qui peut encore s'écrire :

$$\sum_{j=1}^{P} \alpha_{kj} \cdot a_j = \beta_k \qquad \text{[Eq. 12]}$$

avec : $\alpha_{kj} = \sum_{i=1}^{N} \frac{X^{j-1}(x) \cdot X^{k-1}(x)}{\sigma_i^2}$

ou encore : $[\boldsymbol{\alpha}] = \mathbf{A^T} \cdot \mathbf{V^{-1}} \cdot \mathbf{A}$, matrice P x P

et : $\beta_k = \sum_{i=1}^{N} \frac{Y_i \cdot X^{k-1}(x)}{\sigma_i^2}$ ou encore : $[\boldsymbol{\beta}] = \mathbf{A}^{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{b}$, vecteur de dimension P

En introduisant le vecteur **a** :

$$[\boldsymbol{\alpha}] \cdot \mathbf{a} = [\boldsymbol{\beta}] \qquad \text{ou :} \quad \left(\mathbf{A}^{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{A}\right) \cdot \mathbf{a} = \mathbf{A}^{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{b}$$

La solution s'exprime alors :

$$\mathbf{a} = \left(\mathbf{A}^{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{A}\right)^{-1} \cdot \mathbf{A}^{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{b} \qquad \text{[Eq. 13]}$$

Les paramètres recherchés, a_i correspondent aux éléments du vecteur **a**. Les incertitudes associées à ces paramètres sont les termes diagonaux de la matrice des covariances des paramètres ajustés :

$$\mathbf{V}_a = \left[\mathbf{A}^{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{A}\right]^{-1} \quad \text{[Eq. 14]}$$

3.4 Matrice des covariances

Le rendement d'un point individuel correspondant à l'énergie E_i est déterminé expérimentalement selon [Eq. 2] :

$$R_i = \frac{N_i}{A \cdot I_i \cdot t} \cdot C$$

A représente l'activité du radionucléide utilisé pour l'étalonnage, N_i est la surface du pic d'absorption totale correspondant à l'énergie E_i, I_i est l'intensité d'émission gamma de celui-ci et t est la durée d'acquisition. *C* représente le produit des différents facteurs correctifs dont on ne tiendra pas compte en première approximation.

Si l'on utilise un même radionucléide émettant plusieurs énergies, les valeurs expérimentales du rendement obtenues pour ces énergies sont corrélées entre elles *via :*

1. l'activité du radionucléide,
2. les intensités d'émission gamma.

La variance associée à une valeur de rendement est alors :

$$u_c^2(R) = \left(\frac{1}{A \cdot I}\right)^2 \cdot u^2(N) + \left(\frac{N}{A^2 \cdot I}\right)^2 \cdot u^2(A) + \left(\frac{N}{A \cdot I^2}\right)^2 \cdot u^2(I) \qquad \text{[Eq. 15]}$$

et pour le logarithme du rendement, cette expression est :

$$u_c^2(\log(R)) = \left(\frac{u^2(N)}{N^2}\right) + \left(\frac{u^2(A)}{A^2}\right) + \left(\frac{u^2(I)}{I^2}\right) \qquad \text{[Eq. 16]}$$

ou encore :

$$u_c^2(\log(R)) = \frac{u_c^2(R)}{R^2} \qquad \text{[Eq. 17]}$$

La covariance entre 2 valeurs de rendement obtenues avec le même radionucléide s'écrit de même :

$$cov(Log(R_i),Log(R_j)) = \frac{cov(R_i,R_j)}{R_i \cdot R_j} = \left[\frac{u^2(N_i)}{N_i^{\,2}} + \frac{u^2(I_i)}{I_i^{\,2}} \right] \cdot \delta_{ij} + \frac{u^2(A)}{A^2} + \frac{cov(I_i,I_j)}{I_i \cdot I_j}$$

[Eq. 18]

δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

Remarque : Dans le développement actuel du logiciel, la corrélation entre les intensités n'est pas prise en compte ; l'expression de la covariance entre les données i et j s'exprime donc :

$$cov(Log(R_i),Log(R_j)) = \frac{cov(R_i,R_j)}{R_i \cdot R_j} = \left[\frac{u^2(N_i)}{N_i^{\,2}} + \frac{u^2(I_i)}{I_i^{\,2}} \right] \cdot \delta_{ij} + \frac{u^2(A)}{A^2}$$ [Eq. 19]

Ainsi, l'élément diagonal (i, i) de la matrice des covariances correspond à l'incertitude relative associée au $i^{ème}$ point expérimental.
Les éléments non diagonaux de cette matrice (i, j) sont les incertitudes relatives sur l'activité du radionucléide, lorsque les valeurs Ri et Rj sont obtenues avec un même radionucléide, les autres éléments étant nuls.

3.5 Expression des incertitudes selon la fonction d'ajustement

3.5.1 Incertitudes sur les données d'entrée

Pour les deux fonctions (APOCOPE et APOLOG), les données d'entrée correspondent à des logarithmes décimaux :

$$Y = log(R) = \frac{ln(R)}{ln(10)} = \frac{ln(R)}{2.30259}$$ [Eq. 20]

Les incertitudes associées aux valeurs de rendement s'expriment donc :

$$dY = d(log(R)) = \frac{1}{2.30259} \cdot \frac{dR}{R}$$ [Eq. 21]

Donc le terme σ_i dans l'équation 7, correspondant à l'incertitude absolue sur Y, se traduit par l'incertitude relative sur le rendement expérimental, dR/R, divisée par ln(10).

3.5.2 Incertitude sur les résultats

Les valeurs ajustées, R_j, sont calculées selon l'équation 6, en utilisant les paramètres résultant de la procédure de minimisation. La propagation des covariances entre les coefficients vers celle des rendements calculés peut être réduite en une expression matricielle :

$$\mathbf{V}_R = \mathbf{D} \cdot \mathbf{V}_a \cdot \mathbf{D}^T \qquad \text{[Eq. 22]}$$

D est la matrice des dérivées de R par rapport aux paramètres, soit :

Pour la fonction APOLOG:

$$D_{j,\upsilon} = \frac{\partial R_j}{\partial a_\upsilon}\bigg|_{\vec{a}} = R_j \cdot ln(10) \cdot \left[log\left(E_j\right)\right]^{\upsilon-1} \qquad \text{[Eq. 23]}$$

Et pour la fonction APOCOPE :

$$D_{j,\upsilon} = \frac{\partial R_j}{\partial a_\upsilon}\bigg|_{\vec{a}} = R_j \cdot ln(10) \cdot \left[\frac{1}{E_j}\right]^{\upsilon-1} \qquad \text{[Eq.24]}$$

Les carrés des incertitudes absolues sur les valeurs calculées sont donc les éléments diagonaux de la matrice ci-dessus.

3.6 Calcul du rendement pour des énergies différentes des données d'entrée

Les résultats de l'ajustement (coefficients) peuvent également être utilisés pour calculer d'autres valeurs de rendement pour des énergies discrètes, dans une gamme d'énergies entrées par l'utilisateur.
Le calcul des incertitudes associées se fait de la même façon que pour les rendements correspondant aux énergies du fichier d'entrée (voir § 2.5.2).

4. Validation du logiciel AÇORES

Le logiciel AÇORES prend la suite du logiciel EFFIGIE écrit en FORTRAN, conçu par Jean Morel et Michel Vallée [1] et utilisé depuis de nombreuses années pour la spectrométrie gamma au LNHB. EFFIGIE effectue également un ajustement par la méthode de minimisation du χ^2, mais sans prendre en compte les corrélations entre les données d'entrée.

4.1 Comparaison avec EFFIGIE

Afin de tester le présent logiciel, pour un même jeu de données d'entrée, les résultats des ajustements calculés avec et sans corrélations ont été comparés aux résultats obtenus avec EFFIGIE. Les données d'entrée sont présentées dans le tableau 1.

Radionucléide	Energie (keV)	Rendement	Incertitude relative (%)
152Eu	39.9	2.13E-03	0.423
152Eu	45.7	3.42E-03	4.971
133Ba	53.2	5.43E-03	0.994
241Am	59.6	6.79E-03	0.898
133Ba	81	9.01E-03	0.700
152Eu	121.8	9.55E-03	0.701
57Co	122.1	9.70E-03	0.598
133Ba	160.6	8.96E-03	2.600
133Ba	223.2	6.74E-03	3.605
152Eu	244.7	6.07E-03	0.906
133Ba	276.4	5.34E-03	0.506
152Eu	344.3	4.20E-03	0.809
133Ba	356	4.08E-03	0.490
133Ba	383.8	3.76E-03	0.505
152Eu	411.4	3.57E-03	1.092
152Eu	444	3.24E-03	0.802
137Cs	661.7	2.14E-03	0.514
152Eu	778.9	1.82E-03	0.716
152Eu	867.4	1.67E-03	1.016
152Eu	964	1.49E-03	0.805
152Eu	1086.6	1.34E-03	0.671
152Eu	1112.1	1.32E-03	0.608
152Eu	1299.1	1.14E-03	2.719
152Eu	1408	1.06E-03	0.569

Tableau 1 : Données d'entrée du test 1

Les rendements ajustés à partir de ces données d'entrée et les incertitudes relatives associées sont comparés dans le tableau 2. Dans celui-ci, les colonnes 2 à 4 présentent les résultats obtenus par J. Morel avec son fichier test et le logiciel EFFIGIE. Les colonnes 5 à 7 présentent les valeurs obtenues avec le même logiciel d'origine, mais modifié pour pouvoir enregistrer les résultats sous forme de fichier (logiciel EFFIGIE-FILE). Cette version, aujourd'hui utilisée au LNHB, ne présente donc aucune différence dans les calculs d'ajustement ; on note cependant de légers écarts par rapport aux résultats de référence. L'utilisation d'un compilateur FORTRAN plus récent pourrait expliquer ce phénomène, qui s'avère non significatif pour l'utilisation du logiciel en routine.
Enfin, les colonnes 8 à 10 présentent les résultats obtenus avec le logiciel AÇORES. Les valeurs des coefficients ajustés et celles des rendements calculés sont à nouveau très comparables aux résultats précédents (pour les rendements, l'écart maximum entre ces valeurs est de 0.1 %). Cependant les incertitudes calculées sont significativement inférieures aux résultats précédents. En fait, dans EFFIGIE, l'incertitude est calculée en faisant la somme quadratique des incertitudes relatives obtenues par l'ajustement, augmentées d'un facteur faisant intervenir le test de χ^2, et un terme systématique (seuil) correspondant à l'incertitude relative minimum sur les données d'entrée.

	Points expérimentaux		Valeurs calculées (MOREL)			Valeurs calculées (Effigie_file)			Valeurs calculées (ACORES-apolog)		
Energie	Rendement	Incertitude	**Rendement**	Incertitude	résidus (%)	**Rendement**	Incertitude	résidus (%)	**Rendement**	Incertitude	résidus (%)
39.9	2.13E-03	0.423	**0.002133**	0.895	-0.16	**0.002134**	0.896	-0.17	**0.002132**	0.422	-0.12
45.7	3.42E-03	4.971	**0.003546**	0.956	-3.55	**0.003546**	0.956	-3.55	**0.003546**	0.513	-3.54
53.2	5.43E-03	0.994	**0.005353**	1.099	1.50	**0.005353**	1.101	1.49	**0.005354**	0.619	1.48
59.6	6.79E-03	0.898	**0.006678**	1.05	1.68	**0.006678**	1.051	1.68	**0.006678**	0.586	1.67
81	9.01E-03	0.700	**0.009247**	0.824	-2.61	**0.009248**	0.824	-2.62	**0.009247**	0.432	-2.61
121.8	9.55E-03	0.701	**0.009591**	0.787	-0.42	**0.009591**	0.788	-0.42	**0.009590**	0.408	-0.41
122.1	9.70E-03	0.598	**0.009584**	0.787	1.25	**0.009585**	0.788	1.25	**0.009584**	0.408	1.26
160.6	8.96E-03	2.600	**0.008431**	0.781	6.27	**0.008431**	0.782	6.27	**0.008432**	0.404	6.27
223.2	6.74E-03	3.605	**0.006544**	0.751	2.99	**0.006544**	0.752	3.00	**0.006546**	0.384	2.97
244.7	6.07E-03	0.906	**0.006013**	0.722	1.00	**0.006013**	0.722	1.00	**0.006014**	0.362	0.97
276.4	5.34E-03	0.506	**0.005339**	0.668	-0.07	**0.005338**	0.668	-0.06	**0.005340**	0.320	-0.09
344.3	4.20E-03	0.809	**0.004248**	0.585	-1.10	**0.004247**	0.585	-1.09	**0.004249**	0.250	-1.14
356	4.08E-03	0.490	**0.004099**	0.581	-0.45	**0.004098**	0.582	-0.44	**0.004100**	0.247	-0.48
383.8	3.76E-03	0.505	**0.003779**	0.586	-0.43	**0.003779**	0.586	-0.42	**0.003781**	0.251	-0.46
411.4	3.57E-03	1.092	**0.003505**	0.604	1.87	**0.003505**	0.604	1.89	**0.003507**	0.267	1.84
444	3.24E-03	0.802	**0.003228**	0.635	0.48	**0.003227**	0.636	0.50	**0.003229**	0.294	0.45
661.7	2.14E-03	0.514	**0.002128**	0.717	0.66	**0.002127**	0.717	0.69	**0.002129**	0.358	0.63
778.9	1.82E-03	0.716	**0.001819**	0.672	-0.21	**0.001818**	0.672	-0.18	**0.001820**	0.324	-0.25
867.4	1.67E-03	1.016	**0.001647**	0.665	1.62	**0.001647**	0.666	1.66	**0.001648**	0.318	1.57
964	1.49E-03	0.805	**0.001498**	0.693	-0.56	**0.001498**	0.694	-0.52	**0.001499**	0.340	-0.62
1086.6	1.34E-03	0.671	**0.001347**	0.729	-0.38	**0.001346**	0.73	-0.33	**0.001348**	0.368	-0.44
1112.1	1.32E-03	0.608	**0.001319**	0.731	-0.33	**0.001319**	0.732	-0.28	**0.001320**	0.370	-0.39
1299.1	1.14E-03	2.719	**0.001141**	0.755	-0.12	**0.001141**	0.755	-0.06	**0.001142**	0.388	-0.19
1408	1.06E-03	0.569	**0.001052**	0.991	0.32	**0.001051**	0.992	0.39	**0.001052**	0.556	0.26
Energies calculées											
50			**0.004605**	1.196		**0.004605**	1.197		**0.004605**	0.601	
100			**0.009828**	0.794		**0.009828**	0.795		**0.009827**	0.413	
136.54			**0.009200**	0.784		**0.009200**	0.784		**0.009200**	0.405	
200			**0.007189**	0.774		**0.007189**	0.774		**0.007190**	0.399	
302.8			**0.004864**	0.627		**0.004863**	0.627		**0.004865**	0.285	
500			**0.002841**	0.689		**0.002840**	0.69		**0.002842**	0.337	
1000			**0.001450**	0.707		**0.001450**	0.707		**0.001451**	0.351	
1400			**0.001058**	0.963		**0.001057**	0.964		**0.001059**	0.536	
		CHI-2	**44.28**			**44.39**			**44.97**		
	Degré Max		**6**			**6**			**6**		
	Coefficients		-220.798	34.880		-220.780	34.922		-222.086	21.411	
			516.901	92.619		516.855	92.731		520.269	56.893	
			-513.920	101.366		-513.870	101.489		-517.549	62.306	
			275.132	58.539		275.103	58.610		277.195	36.003	
			-83.434	18.818		-83.425	18.841		-84.087	11.580	
			13.534	3.194		13.532	3.197		13.643	1.966	
			-0.914	0.224		-0.914	0.224		-0.922	0.138	

Tableau 2 : Résultats comparatifs entre les versions successives d'EFFIGIE et AÇORES

Il semble en effet discutable que les incertitudes relatives calculées conduisent à des valeurs inférieures à la plus faible incertitude expérimentale (0.42 %). Pour éviter ceci, un critère supplémentaire a donc été ajouté : les carrés des incertitudes relatives annoncés sont la somme quadratique de la plus faible des incertitudes expérimentales relatives et des incertitudes relatives calculées par la méthode d'ajustement. Les résultats correspondants sont présentés dans les trois dernières colonnes du tableau 3.

	Valeurs calculées (EFFIGIE MOREL)			Valeurs calculées (ACORES-apolog)			Valeurs calculées (ACORES-seuil)		
Energie	**Rendement**	Incertitude	résidus (%	**Rendement**	Incertitude	résidus (%)	**Rendement**	Incertitude	résidus (%)
39.9	**0.002133**	0.895	-0.16	**0.002132**	0.422	-0.12	**0.002132**	0.597	-0.09
45.7	**0.003546**	0.956	-3.55	**0.003546**	0.513	-3.54	**0.003545**	0.664	-3.52
53.2	**0.005353**	1.099	1.50	**0.005354**	0.619	1.48	**0.005352**	0.749	1.51
59.6	**0.006678**	1.05	1.68	**0.006678**	0.586	1.67	**0.006676**	0.722	1.70
81	**0.009247**	0.824	-2.61	**0.009247**	0.432	-2.61	**0.009244**	0.604	-2.57
121.8	**0.009591**	0.787	-0.42	**0.009590**	0.408	-0.41	**0.009586**	0.587	-0.36
122.1	**0.009584**	0.787	1.25	**0.009584**	0.408	1.26	**0.009579**	0.587	1.30
160.6	**0.008431**	0.781	6.27	**0.008432**	0.404	6.27	**0.008427**	0.585	6.32
223.2	**0.006544**	0.751	2.99	**0.006546**	0.384	2.97	**0.006541**	0.571	3.04
244.7	**0.006013**	0.722	1.00	**0.006014**	0.362	0.97	**0.006010**	0.556	1.04
276.4	**0.005339**	0.668	-0.07	**0.005340**	0.320	-0.09	**0.005336**	0.530	-0.02
344.3	**0.004248**	0.585	-1.10	**0.004249**	0.250	-1.14	**0.004246**	0.491	-1.05
356	**0.004099**	0.581	-0.45	**0.004100**	0.247	-0.48	**0.004096**	0.489	-0.40
383.8	**0.003779**	0.586	-0.43	**0.003781**	0.251	-0.46	**0.003777**	0.491	-0.38
411.4	**0.003505**	0.604	1.87	**0.003507**	0.267	1.84	**0.003503**	0.500	1.93
444	**0.003228**	0.635	0.48	**0.003229**	0.294	0.45	**0.003225**	0.515	0.54
661.7	**0.002128**	0.717	0.66	**0.002129**	0.358	0.63	**0.002126**	0.554	0.74
778.9	**0.001819**	0.672	-0.21	**0.001820**	0.324	-0.25	**0.001817**	0.532	-0.13
867.4	**0.001647**	0.665	1.62	**0.001648**	0.318	1.57	**0.001646**	0.529	1.70
964	**0.001498**	0.693	-0.56	**0.001499**	0.340	-0.62	**0.001497**	0.543	-0.49
1086.6	**0.001347**	0.729	-0.38	**0.001348**	0.368	-0.44	**0.001346**	0.560	-0.30
1112.1	**0.001319**	0.731	-0.33	**0.001320**	0.370	-0.39	**0.001318**	0.561	-0.25
1299.1	**0.001141**	0.755	-0.12	**0.001142**	0.388	-0.19	**0.001140**	0.573	-0.04
1408	**0.001052**	0.991	0.32	**0.001052**	0.556	0.26	**0.001051**	0.698	0.41
Energies calculées									
50	**0.004605**	1.196		**0.004605**	0.601		**0.004604**	0.735	
100	**0.009828**	0.794		**0.009827**	0.413		**0.009823**	0.591	
136.54	**0.009200**	0.784		**0.009200**	0.405		**0.009195**	0.585	
200	**0.007189**	0.774		**0.007190**	0.399		**0.007186**	0.581	
302.8	**0.004864**	0.627		**0.004865**	0.285		**0.004861**	0.510	
500	**0.002841**	0.689		**0.002842**	0.337		**0.002839**	0.540	
1000	**0.001450**	0.707		**0.001451**	0.351		**0.001449**	0.549	
1400	**0.001058**	0.963		**0.001059**	0.536		**0.001057**	0.683	
	44.28			**44.97**			**45.36**		
Coefficients									
	6			**6**					
	-220.798	34.880		-222.086	21.411		-222.072	21.409	
	516.901	92.619		520.269	56.893		520.237	56.888	
	-513.920	101.366		-517.549	62.306		-517.518	62.301	
	275.132	58.539		277.195	36.003		277.180	36.000	
	-83.434	18.818		-84.087	11.580		-84.083	11.579	
	13.534	3.194		13.643	1.966		13.642	1.966	
	-0.914	0.224		-0.922	0.138		-0.922	0.138	

Tableau 3 : Résultats comparatifs sans et avec incertitude seuil

On observe toujours des écarts entre la version initiale du programme et la nouvelle version, dus au facteur supplémentaire (test de $\chi 2$), mais on atteint désormais un meilleur lissage des incertitudes calculées.

4.2 Changement de base des logarithmes

L'utilisation des logarithmes décimaux pour les données d'entrée oblige à faire intervenir le facteur Ln(10) dans l'expression des dérivées et les calculs d'incertitude. Dans un souci de simplification, le programme a été également adapté en remplaçant les logarithmes décimaux par des logarithmes népériens, ce qui donne les fonctions d'ajustement suivantes :

$$\text{APOLOG :} \qquad ln(R) = \sum_{k=1}^{P} a_k \cdot \left(ln(E)\right)^{k-1} \qquad \text{[Eq. 25]}$$

$$\text{APOCOPE :} \quad ln(R) = \sum_{k=1}^{P} a_k \cdot \left(\frac{1}{E}\right)^{k-1} = \sum_{k=1}^{P} a_k \cdot (E)^{1-k} \qquad \text{[Eq. 26]}$$

Dans ce cas les relations 20 et 21 deviennent respectivement :

$Y = ln(R)$

$dY=dR/R$

et les dérivées pour les fonctions APOLOG et APOCOPE (relations 23 et 24) se simplifient :

$$D_{j,\upsilon} = \left.\frac{\partial R_j}{\partial a_\upsilon}\right|_{\vec{a}} = R_j \cdot \left[ln\left(E_j\right)\right]^{\upsilon-1} \qquad \text{[Eq. 27]}$$

$$D_{j,\upsilon} = \left.\frac{\partial R_j}{\partial a_\upsilon}\right|_{\vec{a}} = R_j \cdot \left[\frac{1}{E_j}\right]^{\upsilon-1} \qquad \text{[Eq. 28]}$$

Le tableau 4 compare les résultats de l'ajustement utilisant les logarithmes népériens (dernières colonnes) à ceux issus des ajustements avec logarithmes décimaux. Les rendements ajustés sont très comparables (écarts maximaux de 0.3 %) et les incertitudes relatives sont identiques ; seuls les coefficients diffèrent évidemment de facteurs multiples de Ln(10).

	Valeurs calculées (MOREL)			Valeurs calculées (ACORES-seuil)			Valeurs calculées (ACORES-seuil_ln)		
Energie	**Rendement**	Incertitude	Résidus (%	**Rendement**	Incertitude	Résidus (%	**Rendement**	Incertitude	Résidus (%
39.9	**0.002133**	0.895	-0.16	**0.002132**	0.597	-0.09	**0.002133**	0.597	-0.12
45.7	**0.003546**	0.956	-3.55	**0.003545**	0.664	-3.52	**0.003546**	0.664	-3.55
53.2	**0.005353**	1.099	1.50	**0.005352**	0.749	1.51	**0.005354**	0.749	1.48
59.6	**0.006678**	1.05	1.68	**0.006676**	0.722	1.70	**0.006679**	0.722	1.66
81	**0.009247**	0.824	-2.61	**0.009244**	0.604	-2.57	**0.009248**	0.604	-2.62
121.8	**0.009591**	0.787	-0.42	**0.009586**	0.587	-0.36	**0.009593**	0.587	-0.43
122.1	**0.009584**	0.787	1.25	**0.009579**	0.587	1.30	**0.009586**	0.587	1.23
160.6	**0.008431**	0.781	6.27	**0.008427**	0.585	6.32	**0.008434**	0.585	6.24
223.2	**0.006544**	0.751	2.99	**0.006541**	0.571	3.04	**0.006548**	0.571	2.93
244.7	**0.006013**	0.722	1.00	**0.006010**	0.556	1.04	**0.006017**	0.556	0.94
276.4	**0.005339**	0.668	-0.07	**0.005336**	0.530	-0.02	**0.005342**	0.530	-0.14
344.3	**0.004248**	0.585	-1.10	**0.004246**	0.491	-1.05	**0.004251**	0.491	-1.18
356	**0.004099**	0.581	-0.45	**0.004096**	0.489	-0.40	**0.004102**	0.489	-0.53
383.8	**0.003779**	0.586	-0.43	**0.003777**	0.491	-0.38	**0.003783**	0.491	-0.52
411.4	**0.003505**	0.604	1.87	**0.003503**	0.500	1.93	**0.003508**	0.500	1.78
444	**0.003228**	0.635	0.48	**0.003225**	0.515	0.54	**0.003230**	0.515	0.39
661.7	**0.002128**	0.717	0.66	**0.002126**	0.554	0.74	**0.002130**	0.554	0.55
778.9	**0.001819**	0.672	-0.21	**0.001817**	0.532	-0.13	**0.001821**	0.532	-0.34
867.4	**0.001647**	0.665	1.62	**0.001646**	0.529	1.70	**0.001650**	0.529	1.48
964	**0.001498**	0.693	-0.56	**0.001497**	0.543	-0.49	**0.001501**	0.543	-0.71
1086.6	**0.001347**	0.729	-0.38	**0.001346**	0.560	-0.30	**0.001349**	0.560	-0.54
1112.1	**0.001319**	0.731	-0.33	**0.001318**	0.561	-0.25	**0.001322**	0.561	-0.50
1299.1	**0.001141**	0.755	-0.12	**0.001140**	0.573	-0.04	**0.001143**	0.573	-0.30
1408	**0.001052**	0.991	0.32	**0.001051**	0.698	0.41	**0.001054**	0.698	0.14
Energies calculées									
50	**0.004605**	1.196		**0.004604**	0.735		**0.004606**	0.735	
100	**0.009828**	0.794		**0.009823**	0.591		**0.009829**	0.590	
136.54	**0.009200**	0.784		**0.009195**	0.585		**0.009202**	0.585	
200	**0.007189**	0.774		**0.007186**	0.581		**0.007193**	0.581	
302.8	**0.004864**	0.627		**0.004861**	0.510		**0.004867**	0.510	
500	**0.002841**	0.689		**0.002839**	0.540		**0.002844**	0.540	
1000	**0.001450**	0.707		**0.001449**	0.549		**0.001453**	0.549	
1400	**0.001058**	0.963		**0.001057**	0.683		**0.001060**	0.683	
	44.28			**45.36**			**45.24**		
Coefficients									
	6								
	-220.798	34.880		-222.072	21.409		-511.097	49.279	
	516.901	92.619		520.237	56.888		519.955	56.869	
	-513.920	101.366		-517.518	62.301		-224.621	27.048	
	275.132	58.539		277.180	36.000		52.246	6.788	
	-83.434	18.818		-84.083	11.579		-6.883	0.948	
	13.534	3.194		13.642	1.966		0.485	0.070	
	-0.914	0.224		-0.922	0.138		-0.014	0.002	

Tableau 4 : Résultats comparatifs des ajustements avec logarithmes décimaux et népériens

4.3 Prise en compte des corrélations entre les données d'entrée

Après validation de la version du logiciel avec des données non corrélées, dans un second temps, les ajustements sont calculés avec des données d'entrée corrélées, telles qu'elles sont présentées dans le tableau 5. Dans ce cas, la corrélation correspond à l'incertitude-type relative associée à l'activité du radionucléide, facteur commun à l'ensemble des énergies.

Radionucléide	Énergie	Rendement	Incertitude	Corrélation
152Eu	39.9	2.13E-03	0.423	0.3
152Eu	45.7	3.42E-03	4.971	0.3
133Ba	53.2	5.43E-03	0.994	0.4
241Am	59.6	6.79E-03	0.898	0
133Ba	81	9.01E-03	0.700	0.4
152Eu	121.8	9.55E-03	0.701	0.3
57Co	122.1	9.70E-03	0.598	0
133Ba	160.6	8.96E-03	2.600	0.4
133Ba	223.2	6.74E-03	3.605	0.4
152Eu	244.7	6.07E-03	0.906	0.3
133Ba	276.4	5.34E-03	0.506	0.4
152Eu	344.3	4.20E-03	0.809	0.3
133Ba	356	4.08E-03	0.490	0.4
133Ba	383.8	3.76E-03	0.505	0.4
152Eu	411.4	3.57E-03	1.092	0.3
152Eu	444	3.24E-03	0.802	0.3
137Cs	661.7	2.14E-03	0.514	0
152Eu	778.9	1.82E-03	0.716	0.3
152Eu	867.4	1.67E-03	1.016	0.3
152Eu	964	1.49E-03	0.805	0.3
152Eu	1086.6	1.34E-03	0.671	0.3
152Eu	1112.1	1.32E-03	0.608	0.3
152Eu	1299.1	1.14E-03	2.719	0.3
152Eu	1408	1.06E-03	0.569	0.3

Tableau 5 : Données d'entrée avec corrélations

Les résultats sont présentés dans le tableau 6 où figurent successivement les ajustements en utilisant les logarithmes décimaux avec corrélation et les incertitudes calculées initialement, les résultats avec les incertitudes calculées en incluant une valeur seuil (comparable au tableau 3), puis les ajustements en utilisant les logarithmes népériens (comparable au tableau 4).
La prise en compte des corrélations conduit à des valeurs de rendement différant de 0.1 à 0.6 % des résultats obtenus sans corrélations. Hormis pour les valeurs extrêmes, les incertitudes relatives associées sont légèrement supérieures. Ainsi, pour l'ajustement effectué avec une incertitude seuil, elles varient entre 0.52 à 0.77 % au lieu de 0.49 à 0.75 % sans les corrélations.

	Valeurs calculées (MOREL)			Valeurs calculées (2008-apolog_corr)			Val calc. (2008-apolog_corr_seuil)			Val calc. (2008-apolog_corr_seuil_ln)		
Energie	**Rendement**	Incertitude	résidus (%)	**Rendement**	Incertitude	résidus (%)	**Rendement**	Incertitude	résidus (%)	**Rendement**	Incertitude	résidus (%)
39.9	**0.002133**	0.895	-0.162	**0.002136**	0.384	-0.266	**0.002136**	0.571	-0.266	**0.002136**	0.571	-0.265
45.7	**0.003546**	0.956	-3.548	**0.003563**	0.528	-4.013	**0.003563**	0.677	-4.013	**0.003563**	0.677	-4.012
53.2	**0.005353**	1.099	1.495	**0.005380**	0.641	0.980	**0.005380**	0.768	0.980	**0.005380**	0.768	0.981
59.6	**0.006678**	1.05	1.683	**0.006704**	0.600	1.284	**0.006704**	0.734	1.284	**0.006704**	0.734	1.286
81	**0.009247**	0.824	-2.609	**0.009249**	0.407	-2.626	**0.009249**	0.587	-2.626	**0.009249**	0.587	-2.625
121.8	**0.009591**	0.787	-0.418	**0.009593**	0.400	-0.441	**0.009593**	0.582	-0.441	**0.009593**	0.582	-0.439
122.1	**0.009584**	0.787	1.249	**0.009587**	0.400	1.224	**0.009587**	0.582	1.224	**0.009586**	0.582	1.226
160.6	**0.008431**	0.781	6.271	**0.008457**	0.400	5.948	**0.008457**	0.582	5.948	**0.008457**	0.582	5.951
223.2	**0.006544**	0.751	2.993	**0.006584**	0.392	2.368	**0.006584**	0.577	2.368	**0.006584**	0.577	2.371
244.7	**0.006013**	0.722	1	**0.006052**	0.381	0.345	**0.006052**	0.570	0.345	**0.006052**	0.570	0.348
276.4	**0.005339**	0.668	-0.066	**0.005374**	0.358	-0.729	**0.005374**	0.554	-0.729	**0.005374**	0.554	-0.726
344.3	**0.004248**	0.585	-1.104	**0.004273**	0.310	-1.675	**0.004273**	0.525	-1.675	**0.004272**	0.525	-1.673
356	**0.004099**	0.581	-0.452	**0.004121**	0.306	-1.003	**0.004121**	0.522	-1.003	**0.004121**	0.522	-1.001
383.8	**0.003779**	0.586	-0.432	**0.003798**	0.300	-0.921	**0.003798**	0.519	-0.921	**0.003798**	0.519	-0.919
411.4	**0.003505**	0.604	1.871	**0.003520**	0.302	1.436	**0.003520**	0.520	1.436	**0.003520**	0.520	1.438
444	**0.003228**	0.635	0.479	**0.003239**	0.310	0.127	**0.003239**	0.524	0.127	**0.003239**	0.524	0.129
661.7	**0.002128**	0.717	0.663	**0.002129**	0.347	0.623	**0.002129**	0.547	0.623	**0.002129**	0.547	0.624
778.9	**0.001819**	0.672	-0.208	**0.001819**	0.339	-0.244	**0.001819**	0.542	-0.244	**0.001819**	0.542	-0.244
867.4	**0.001647**	0.665	1.624	**0.001649**	0.350	1.539	**0.001649**	0.549	1.539	**0.001649**	0.549	1.538
964	**0.001498**	0.693	-0.562	**0.001501**	0.376	-0.723	**0.001501**	0.566	-0.723	**0.001501**	0.566	-0.724
1086.6	**0.001347**	0.729	-0.375	**0.001351**	0.405	-0.639	**0.001351**	0.586	-0.639	**0.001351**	0.586	-0.640
1112.1	**0.001319**	0.731	-0.326	**0.001323**	0.408	-0.609	**0.001323**	0.588	-0.609	**0.001323**	0.588	-0.610
1299.1	**0.001141**	0.755	-0.119	**0.001145**	0.421	-0.462	**0.001145**	0.597	-0.462	**0.001145**	0.597	-0.464
1408	**0.001052**	0.991	0.322	**0.001055**	0.533	0.029	**0.001055**	0.681	0.029	**0.001055**	0.681	0.026
rgies calculées												
50	**0.004605**	1.196		**0.004630**	0.624		**0.004630**	0.754		**0.004630**	0.754	
100	**0.009828**	0.794		**0.009822**	0.391		**0.009822**	0.576		**0.009821**	0.576	
136.54	**0.009200**	0.784		**0.009212**	0.401		**0.009212**	0.583		**0.009212**	0.583	
200	**0.007189**	0.774		**0.007227**	0.399		**0.007227**	0.581		**0.007227**	0.581	
302.8	**0.004864**	0.627		**0.004895**	0.337		**0.004895**	0.541		**0.004895**	0.541	
500	**0.002841**	0.689		**0.002847**	0.330		**0.002847**	0.536		**0.002847**	0.536	
1000	**0.001450**	0.707		**0.001453**	0.387		**0.001453**	0.573		**0.001453**	0.573	
1400	**0.001058**	0.963		**0.001061**	0.520		**0.001061**	0.670		**0.001061**	0.670	
	44.28			**50.92**			**50.92**			**50.88**		
	6			**6**								
	-220.798	34.880		-242.410	20.126		-242.410	20.126		-558.132	46.341	
	516.901	92.619		574.036	53.170		574.036	53.170		573.992	53.168	
	-513.920	101.366		-576.029	57.885		-576.029	57.885		-250.145	25.138	
	275.132	58.539		310.674	33.250		310.674	33.250		58.591	6.271	
	-83.434	18.818		-94.731	10.632		-94.731	10.632		-7.759	0.871	
	13.534	3.194		15.425	1.795		15.425	1.795		0.549	0.064	
	-0.914	0.224		-1.045	0.125		-1.045	0.125		-0.016	0.002	

Tableau 6 : Résultats des ajustements avec des données d'entrée corrélées

4.4 Résultats obtenus pour l'exercice GAM83

Un test complémentaire a été effectué en utilisant les données de l'exercice GAM83 [6] cette action internationale, lancée dans le cadre de l'International Committee for Radionuclide Metrology (ICRM), avait pour but de comparer les procédures d'interpolation utilisées pour le rendement des spectromètres gamma. Quatre séries de données d'entrée (énergie-rendement) avec les incertitudes associées étaient fournies aux participants :

- Série 1 : « haute précision » (incertitudes relatives < 1 %) avec un grand nombre de données mesurées ; dans ce cas, une information complémentaire était disponible avec les composantes des incertitudes, offrant donc la possibilité de prendre en compte les corrélations entre les données d'entrée.
- Série 2 : « faible précision » (incertitudes comprises entre 3 et 5 %) avec un petit nombre de données d'entrée ;
- Série 3 : « basse énergie » ;
- Série 4 : haute précision avec un petit nombre de données d'entrée.

Pour les trois premiers jeux de données, l'exercice consistait à calculer les rendements ajustés pour les énergies d'entrée et pour une série d'énergies intermédiaires. Pour le quatrième jeu, il était demandé de déterminer l'activité de deux radionucléides en utilisant les valeurs des rendements ajustés.

Les résultats de l'exercice pour les énergies d'entrée sont présentés dans les tableaux 7 à 10. Les 4 (5 pour le tableau 7) premières colonnes contiennent les données d'entrée, les colonnes 5 à 8 (6 à 9 pour le tableau 7) présentent les résultats obtenus avec AÇORES, et les deux dernières colonnes comportent les résultats des participants à l'exercice GAM83 : rapport moyen des rendements calculés par rapport aux rendements mesurés et incertitude moyenne.

Radionucléide	Energie (keV)	Rendement mesuré	Incertitude relative sur mesure (%)	Corrélation	Rendement calculé	Incertitude relative sur calcul (%)	Résidu	Rapport mesure / calcul	Rapport moyen	Incertitude moyenne (%)
241Am	59.537	0.0009080	0.6		0.0009065	0.65	0.17	1.00	0.99	0.63
109Cd	88.037	0.0011694	0.67		0.0011765	0.61	-0.60	0.99	0.99	0.61
57Co	122.063	0.0012145	0.68		0.0012174	0.41	-0.24	1.00	1.00	0.49
Tc-99m	140.479	0.0011715	0.89		0.0011654	0.35	0.52	1.01	1.01	0.49
139Ce	165.853	0.0010664	0.27		0.0010626	0.33	0.36	1.00	1.01	0.29
111In	171.28	0.0010382	0.38	0.17	0.0010389	0.33	-0.07	1.00	1.01	0.32
111In	245.39	0.0007470	0.33	0.17	0.0007477	0.34	-0.10	1.00	1.01	0.31
203Hg	279.188	0.0006408	1.29		0.0006486	0.34	-1.20	0.99	1.00	0.46
131I	364.48	0.0004714	0.44		0.0004754	0.35	-0.83	0.99	1.00	0.34
198Au	411.795	0.0004131	0.76		0.0004118	0.35	0.33	1.00	1.00	0.37
Ag-108m	433.927	0.0003897	0.59	0.4	0.0003874	0.34	0.60	1.01	1.01	0.34
207Bi	569.685	0.0002867	0.57		0.0002848	0.32	0.65	1.01	1.00	0.31
134Cs	604.699	0.0002676	0.33		0.0002670	0.32	0.21	1.00	1.00	0.28
Ag-108m	614.37	0.0002642	0.51	0.4	0.0002626	0.32	0.63	1.01	1.00	0.29
137Cs	661.645	0.0002452	0.61		0.0002428	0.31	1.00	1.01	1.00	0.29
94Nb	702.627	0.0002301	0.59	0.5	0.0002281	0.31	0.87	1.01	1.00	0.29
Ag-108m	722.95	0.0002231	0.51	0.4	0.0002215	0.31	0.70	1.01	1.00	0.27
54Mn	834.827	0.0001917	0.33		0.0001918	0.31	-0.01	1.00	1.00	0.26
94Nb	871.099	0.0001851	0.58	0.5	0.0001839	0.32	0.68	1.01	1.00	0.28
46Sc	889.25	0.0001798	0.37	0.2	0.0001802	0.32	-0.25	1.00	1.00	0.29
46Sc	1120.51	0.0001436	0.38	0.2	0.0001441	0.32	-0.33	1.00	1.00	0.27
60Co	1173.208	0.0001379	0.65	0.47	0.0001378	0.32	0.07	1.00	1.00	0.32
22Na	1274.54	0.0001271	0.63		0.0001271	0.32	-0.01	1.00	1.00	0.3
60Co	1332.47	0.0001216	0.61	0.47	0.0001216	0.32	-0.03	1.00	1.00	0.32
24Na	1368.53	0.0001188	0.42	0.3	0.0001185	0.32	0.29	1.00	1.01	0.3
140La	1596.49	0.0001013	0.58		0.0001014	0.33	-0.13	1.00	1.00	0.33
88Y	1836.04	0.0000880	0.28		0.0000875	0.36	0.48	1.00	1.00	0.32
208Tl	2614.6	0.0000596	0.7		0.0000593	0.45	0.49	1.00	1.00	0.51
24Na	2754.09	0.0000560	0.58	0.3	0.0000560	0.53	0.09	1.00	1.00	0.56

Tableau 7 : Résultats de l'exercice GAM83 pour le jeu d'entrée 1

Radionucléide	Energie (keV)	Rendement mesuré	Incertitude relative sur mesure (%)	Rendement calculé	Incertitude relative sur calcul (%)	Résidu	Rapport mesure / calcul	Rapport moyen	Incertitude moyenne (%)
241Am	59.6	0.02421	2.6	0.02418	2.80	0.13	1.00	1.01	3.30
144Ce	80.1	0.03190	12.23	0.03547	4.39	-10.07	0.90	0.94	5.70
109Cd	88	0.03740	5.61	0.03734	4.64	0.15	1.00	1.02	4.70
144Ce	133.5	0.03840	7.03	0.03567	3.99	7.66	1.08	1.04	4.80
152Eu	244.7	0.02095	3.68	0.02204	2.90	-4.95	0.95	0.96	3.20
152Eu	344.3	0.01632	2.88	0.01580	2.39	3.31	1.03	1.03	3.30
137Cs	661.6	0.00848	2.95	0.00855	2.29	-0.78	0.99	0.99	2.00
152Eu	778	0.00710	3.66	0.00740	2.00	-4.05	0.96	0.96	2.10
88Y	898	0.00681	3.38	0.00653	1.80	4.35	1.04	1.04	2.10
152Eu	964	0.00586	3.58	0.00614	1.80	-4.50	0.96	0.96	2.10
152Eu	1085.8	0.00587	3.75	0.00554	1.97	6.04	1.06	1.05	2.20
152Eu	1112.1	0.00543	3.68	0.00542	2.02	0.13	1.00	1.00	1.90
152Eu	1408	0.00434	3.23	0.00443	2.33	-1.97	0.98	0.98	2.00
88Y	1836.1	0.00354	1.07	0.00353	1.51	0.04	1.00	1.00	1.40

Tableau 8 : Résultats de l'exercice GAM83 pour le jeu d'entrée 2

Radionucléide	Energie (keV)	Rendement mesuré	Incertitude relative sur mesure (%)	Rendement calculé	Incertitude relative sur calcul (%)	Résidu	Rapport mesure / calcul	Rapport moyen	Incertitude moyenne (%)
57Co	6.4	0.007970	4.02	0.007967	4.08	0.04	1.00	0.56	3.60
65Zn	8.2	0.008000	3.75	0.008013	3.60	-0.17	1.00	0.86	2.90
88Y	14.1	0.007800	2.56	0.007810	2.07	-0.12	1.00	0.99	2.00
88Y	15.9	0.007890	3.04	0.007815	1.94	0.96	1.01	1.01	1.90
109Cd	22.1	0.008140	3.07	0.008157	1.63	-0.21	1.00	0.99	1.70
109Cd	25	0.008190	3.05	0.008424	1.55	-2.78	0.97	0.97	1.70
241Am	26.35	0.008550	3.04	0.008560	1.53	-0.11	1.00	1.00	1.50
139Ce	33.3	0.009270	2.05	0.009273	1.46	-0.04	1.00	1.00	1.30
139Ce	38	0.010100	2.18	0.009697	1.41	4.15	1.04	1.04	1.70
152Eu	39.9	0.009350	4.06	0.009843	1.38	-5.01	0.95	0.96	1.70
152Eu	45.7	0.009860	3.96	0.010178	1.30	-3.12	0.97	0.98	1.40
241Am	59.54	0.010220	0.98	0.010262	1.28	-0.41	1.00	1.00	0.97
109Cd	88	0.008370	3.46	0.008307	1.45	0.76	1.01	1.00	1.50
57Co	122.06	0.005370	3.38	0.005350	1.24	0.37	1.00	1.00	0.82
57Co	136.47	0.004360	0.93	0.004360	1.17	0.00	1.00	1.00	0.86
139Ce	165.85	0.002860	1.05	0.002884	1.21	-0.84	0.99	0.99	0.88
152Eu	244.7	0.001150	3.48	0.001118	1.51	2.89	1.03	1.02	1.60
133Ba	276.4	0.000820	2.44	0.000827	1.54	-0.88	0.99	1.00	1.40
133Ba	302.8	0.000654	2.14	0.000665	1.50	-1.66	0.98	0.99	1.40
152Eu	344.3	0.000506	2.96	0.000497	1.26	1.86	1.02	1.03	1.30
133Ba	356	0.000459	1.09	0.000462	1.18	-0.67	0.99	1.00	0.97
133Ba	383.9	0.000392	1.02	0.000395	1.32	-0.72	0.99	1.00	1.20

Tableau 9 : Résultats de l'exercice GAM83 pour le jeu d'entrée 3

Radionucléide	Energie (keV)	Rendement mesuré	Incertitude relative sur mesure (%)	Rendement calculé	Incertitude relative sur calcul (%)	Résidu	Rapport mesure / calcul	Rapport moyen	Incertitude moyenne (%)
241Am	59.537	0.006078	1.72	0.006090	1.69	-0.20	1.00	1.01	2.10
133Ba	81	0.007353	1.56	0.007319	1.22	0.46	1.00	1.00	1.60
57Co	122.061	0.007131	0.47	0.007133	0.54	-0.02	1.00	1.00	0.63
133Ba	356.014	0.0027054	1.3	0.002711	1.13	-0.21	1.00	1.01	1.40
137Cs	661.66	0.0013553	0.78	0.001339	0.60	1.24	1.01	1.01	0.75
54Mn	834.843	0.0010431	0.48	0.001050	0.46	-0.69	0.99	0.99	0.62
60Co	1173.238	0.0007504	0.28	0.000749	0.37	0.21	1.00	1.00	0.59
22Na	1274.542	0.000692	0.4	0.000689	0.34	0.37	1.00	1.00	0.53
60Co	1332.502	0.000658	0.29	0.000659	0.38	-0.16	1.00	1.00	0.73

Tableau 10 : Résultats de l'exercice GAM83 pour le jeu d'entrée 4

Le tableau 11 présente les résultats de l'exercice pour des énergies intermédiaires pour les trois premières séries de données. Les colonnes 2 et 3 présentent les rendements et incertitudes relatives obtenus avec AÇORES ; les colonnes 4 et 5 contiennent les rendements et incertitudes relatives moyens calculés par les participants et la dernière colonne présente le rapport entre les colonnes 2 et 4, c'est-à-dire entre les rendements calculés avec AÇORES et les rendements moyens calculés par les participants.

Enfin, le tableau 12 contient les résultats de calcul d'activité pour ^{134}Cs et ^{152}Eu en utilisant respectivement 2 et 6 surfaces de pic d'absorption totale et les rendements calculés correspondants.

Résultat set 1

Energie (keV)	Rendement calculé	Incertitude relative (%)	Valeur moyenne	Incertitude moyenne (%)	Rapport
100	0.0012199	0.54	0.0012270	1.00	0.99
300	0.0005973	0.35	0.0005905	0.50	1.01
500	0.0003293	0.33	0.0003307	0.43	1.00
1000	0.0001608	0.32	0.0001595	0.42	1.01
2200	0.0000718	0.39	0.0000722	0.46	0.99

Résultat set 2

Energie (keV)	Rendement calculé	Incertitude relative (%)	Valeur moyenne	Incertitude moyenne (%)	Rapport
100	0.038392	4.62	0.038670	5.10	0.99
300	0.018081	2.53	0.018010	3.20	1.00
500	0.011045	2.46	0.011090	2.60	1.00
1000	0.005944	1.83	0.005938	2.20	1.00
2200	0.003044	5.29	0.002978	3.00	1.02

Résultat set 3

Energie (keV)	Rendement calculé	Incertitude relative (%)	Valeur moyenne	Incertitude moyenne (%)	Rapport
10	0.007957	3.16	0.00823	3.0	0.97
20	0.007996	1.72	0.008044	1.9	0.99
50	0.010310	1.27	0.01022	1.6	1.01
100	0.007205	1.41	0.007262	1.4	0.99
200	0.001848	1.37	0.001847	1.5	1.00

Tableau 11 : Résultats de l'exercice GAM83 pour des énergies intermédiaires

Résultat set 4					
Radionucléide	Activité (Bq)	Incertitude relative (%)	Valeur moyenne	Incertitude moyenne (%)	Rapport
134Cs	26655	1.01	2.650E+04	0.83	1.006
152Eu	86964	0.75	8.719E+04	0.74	0.997

Tableau 12 : Résultats de l'exercice GAM83 pour le calcul d'activité

L'exercice GAM83 ne permet pas de qualifier de manière absolue les performances du logiciel AÇORES, puisque, dans cet exercice, l'ensemble des résultats des participants sont pris en compte pour les comparaisons. Cependant, les résultats obtenus se situent parfaitement dans la moyenne des autres participants, ce qui conforte la qualité de calculs effectués par AÇORES.

5. Utilisation pratique du logiciel AÇORES

Le logiciel AÇORES est conçu à l'aide de l'outil de développement MATLAB (version 7.3) [7], sous environnement Windows®. MATLAB dispose en particulier de modules de calcul matriciel qui sont utilisés pour développer aisément la procédure d'ajustement de fonction décrite au §2. Le logiciel a été initialement développé par la société Quartz Data, selon le cahier des charges établi au LNHB, puis modifié par nos soins. Les fonctionnalités du logiciel sont développées dans le manuel d'utilisation inclus en Annexe ; les grandes lignes en sont rappelées ci-dessous.

5.1 Lecture du fichier d'entrée

Le fichier d'entrée est un fichier EXCEL® incluant deux feuilles. La première feuille se présente sous forme d'un tableau comportant N lignes, correspondant aux N points expérimentaux, et 3 colonnes. Chaque ligne doit inclure les informations suivantes :

Colonne 1 : validation ou non de la donnée
Colonne 2 : radionucléide utilisé pour la détermination du rendement
Colonne 3 : énergie (en keV)
Colonne 4 : rendement expérimental
Colonne 5 : incertitude composée totale relative sur le rendement (en %)
Colonne 6 : incertitude relative sur l'activité utilisée pour la détermination du rendement (en %) (terme de corrélation)

Remarque : pour les radionucléides n'ayant qu'une énergie, la colonne 6 est égale à 0. Pour les radionucléides ayant plusieurs énergies, pour chacune d'elles, la colonne 6 contient la même valeur correspondant à l'incertitude sur l'activité utilisée.

La seconde feuille ne comporte qu'une seule colonne dans laquelle figurent les énergies pour lesquelles on souhaite calculer le rendement.

5.2 Affichage des valeurs expérimentales

La figure 1 présente l'exemple de la visualisation des données d'entrée correspondant au tableau 5.

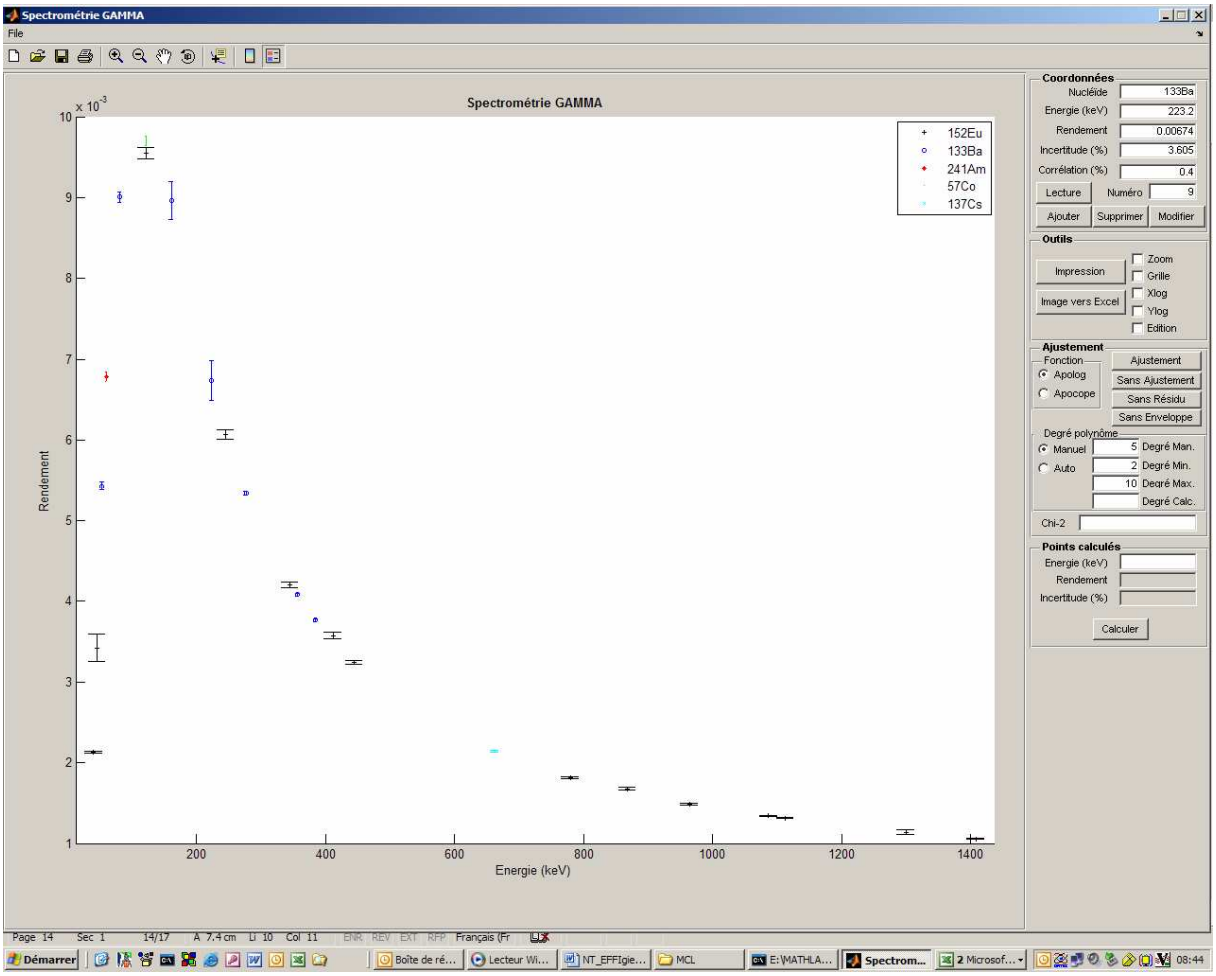


Figure 1 : Fenêtre de visualisation des données

Cette fenêtre graphique permet d'afficher les données d'entré par points, avec en abscisse l'énergie et en ordonnée le rendement ; pour chaque point les barres d'incertitudes sont également affichées. Chaque couleur de point identifie un même radionucléide.
Les valeurs numériques correspondantes sont affichées en haut à droite de cet écran. Il est possible de modifier une donnée quelconque, d'en supprimer ou d'en ajouter une.
On dispose également dans cette fenêtre d'outils graphiques de zoom, changement d'échelle (Lin/log), etc.
Les boutons d'ajustement (au milieu à droite) sont utilisés pour sélectionner le type de la fonction d'ajustement et le choix ou non du degré d'ajustement. Si le degré de l'ajustement est imposé ('manuel'), on n'exécute qu'une seule fois la procédure. Dans le cas où le degré est libre ('auto'), l'ajustement est répété plusieurs fois en augmentant progressivement le degré de la fonction. A l'issue de chaque ajustement, on calcule le χ^2 obtenu : celui-ci diminue au fur et à mesure que l'on augmente le degré d'ajustement, puis ré-augmente. Le degré optimal est celui pour lequel la valeur de χ^2 passe par son minimum.

5.3 Ajustement

La figure 2 présente le résultat de l'ajustement effectué avec la fonction APOLOG en laissant le degré d'ajustement libre. La fonction ajustée est superposée aux points expérimentaux comme une ligne continue. Les résidus sont affichés dans cadre inférieur, en conservant le codage couleur qui permet de mettre en évidence un éventuel biais pour les données communes à un même radionucléide.

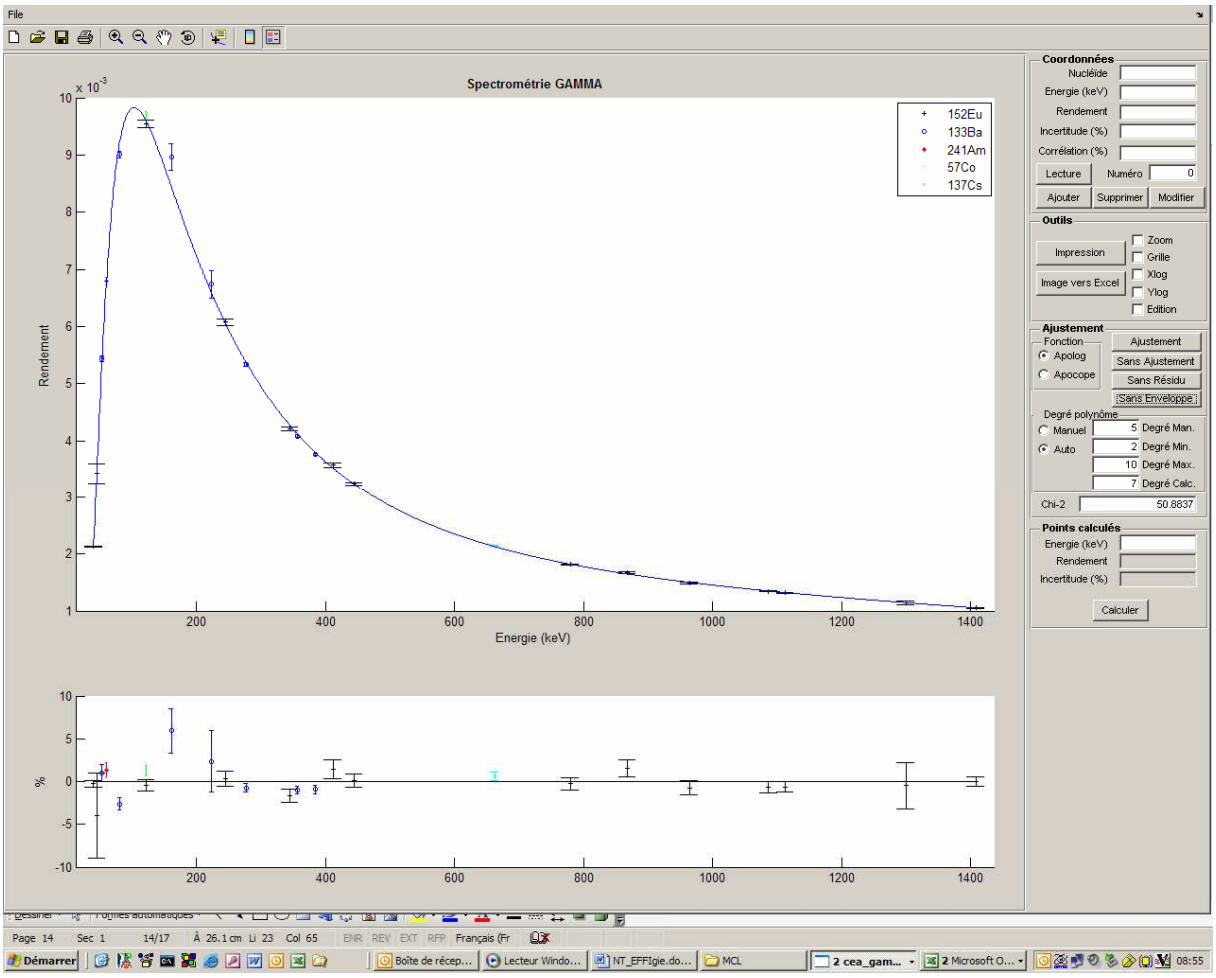


Figure 2 : Ajustement d'une fonction APOLOG

Le degré d'ajustement et la valeur du χ^2 apparaissent dans la partie gauche au milieu de cet écran.
Grâce au champ de saisie situé dans la partie en bas à droite de la fenêtre, il est possible de calculer des rendements associés à des énergies spécifiques.

5.4 Fichier de sortie

Les résultats sont enregistrés dans un fichier EXCEL® comportant deux feuilles. La première présentée dans le tableau 13 comporte les données d'entrée et les résultats de l'ajustement (rendement, incertitude, résidus).

Radionucléide	Énergie	Rendement	Incertitude	Corrélation	Rendement calculé	Incertitude associée	Résidu
152Eu	39.9	0.00213	0.423	0.3	0.00213565	0.57121286	0.26475169
152Eu	45.7	0.00342	4.971	0.3	0.00356293	0.67686232	4.01151125
133Ba	53.2	0.005433	0.994	0.4	0.0053802	0.76805616	0.98143103
241Am	59.6	0.00679	0.898	0	0.00670378	0.73399191	1.28621358
133Ba	81	0.009006	0.7	0.4	0.00924874	0.58674565	2.62455253
152Eu	121.8	0.009551	0.701	0.3	0.00959309	0.58229176	0.43870833
57Co	122.1	0.009704	0.598	0	0.0095865	0.58232482	1.22569426

133Ba	160.6	0.00896	2.6	0.4	0.00845675	0.58188362	5.95088413
133Ba	223.2	0.00674	3.605	0.4	0.00658392	0.57698434	2.37067008
152Eu	244.7	0.006073	0.906	0.3	0.00605197	0.56956264	0.34754823
133Ba	276.4	0.005335	0.506	0.4	0.00537404	0.55434556	0.72644208
152Eu	344.3	0.004201	0.809	0.3	0.00427248	0.52471463	1.67309504
133Ba	356	0.00408	0.49	0.4	0.00412125	0.52191313	1.00084141
133Ba	383.8	0.003763	0.505	0.4	0.00379791	0.51863368	0.91929474
152Eu	411.4	0.003571	1.092	0.3	0.00352037	0.51957779	1.43810035
152Eu	444	0.003243	0.802	0.3	0.00323883	0.52445303	0.128659
137Cs	661.7	0.002142	0.514	0	0.00212872	0.54712996	0.62363035
152Eu	778.9	0.001815	0.716	0.3	0.00181944	0.54219944	0.24405634
152Eu	867.4	0.001674	1.016	0.3	0.00164864	0.54872302	1.53814726
152Eu	964	0.00149	0.805	0.3	0.00150087	0.56625021	0.72417664
152Eu	1086.6	0.001342	0.671	0.3	0.00135064	0.58585749	0.63980892
152Eu	1112.1	0.001315	0.608	0.3	0.00132307	0.58770562	0.60986094
152Eu	1299.1	0.00114	2.719	0.3	0.00114531	0.59705847	0.46398853
152Eu	1408	0.001055	0.569	0.3	0.00105473	0.6807861	0.0259785

Tableau 13 : Fichier de résultats

La seconde feuille contient la date de réalisation de l'ajustement et les principaux paramètres : type de fonction, degré, coefficients ajustés, valeur du χ^2, ainsi que les valeurs calculées (rendement et incertitude) pour d'autres énergies. De plus, le tracé de l'ajustement y est enregistré sous forme d'un fichier image, ce qui permet de l'introduire ultérieurement dans un document quelconque.

6. Conclusion

Le logiciel AÇORES, conçu pour calculer le meilleur ajustement d'une fonction aux couples de valeurs expérimentales (rendement-énergie), a été testé sur un jeu-type de données d'entrée et également comparé aux résultats obtenus lors d'un exercice international. Ces tests montrent un bon comportement du logiciel AÇORES et un accord entre les résultats obtenus avec le code EFFIGIE utilisé jusqu'à présent et ceux obtenus avec le nouveau logiciel. Le logiciel AÇORES est donc validé et pourra désormais être appliqué en routine au LNHB.
La convivialité du logiciel, avec ses modules de visualisation, la possibilité de modifier les données d'entrée ainsi que la sauvegarde automatique des résultats, en fait un outil présentant de bonnes garanties de fiabilité des courbes de rendement utilisées pour les applications quantitatives en spectrométrie gamma (mesure d'activité ou détermination d'intensités d'émission photonique).

La prise en compte des corrélations entre les données d'entrée constitue une avancée significative pour la qualité métrologique des rendements interpolés et plus particulièrement de leurs incertitudes-types. En effet, l'incertitude associée à l'activité d'un radionucléide émettant plusieurs raies est un paramètre commun qui est désormais pris en compte dans la procédure d'ajustement et de propagation des incertitudes. Certes, les incertitudes-types sur le rendement ainsi déterminées sont légèrement différentes des incertitudes-types préalablement calculées, mais leur validité est établie plus strictement.
Pour être tout à fait rigoureux, il serait nécessaire de prendre également en compte les corrélations entre les intensités d'émission photoniques des différentes raies caractérisant un même radionucléide [3], mais jusqu'à présent, cette information n'est pas aisément disponible.

7. Références

[1] J. Morel, M. Vallée
Détermination de la réponse en efficacité des détecteurs gamma-X par lissage de points expérimentaux : code EFFIGIE. Version avril 1996.
Communication non référencée

[2] L. Venturini et V.R. Vanin
HPGe detector efficiency calibration for extended sources in the 50-1400 keV energy range
Appl. Radiat. Isot. Vol. 44 N°7 (1993) 999-1002.

[3] R.M. Castro, V.R. Vanin, O. Helne, P.R. Pascholati, N.L. Maidana, M.S. Dias et M.F. Koskinas
The interplay between the statistical correlation of γ-ray emission probabilities and efficiency calibration
Appl. Radiat. Isot. 60 (2004) 185-190.

[4] L.P. Geraldo et D.L. Smith
Covariance analysis and fitting of germanium gamma-ray detector efficiency calibration data
Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. A 290 (1990) 499-508.

[5] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery
Numerical Recipes in Fortran 77 : the art of scientific computing - Second edition
Cambridge University Press (1992).

[6] W. L. Zijp, A. N. Polle, H. J. Holthenius
International comparison of interpolation procedure for the efficiency of germanium gamma-ray spectrometers (GAM83 exercise)
Report ECN-181 (January 1986) Netherlands Energy Research Foundation

[7] MATLAB. : www.mathwords.com

Annexe : Manuel d’utilisation

QUARTZ DATA ALYOTECH	Direction IST	
Date	Référence	Version	Pages
24/01/2008	QD/200608F15/MU-001	B.01	37

CEA

Spectrométrie GAMMA

Manuel d'Utilisation

de Spectrométrie GAMMA

Quartz Data - Groupe Alyotech

Mini parc du Verger - 1 rue de Terre-Neuve - Immeuble K - 91967 COURTABOEUF Cedex

Téléphone : 01 60 92 33 00 - Télécopie : 01 64 46 46 79 - Internet : http://www.qds.fr

Agence de RENNES	Agence de LYON	Agence de TOULOUSE
7 Parc d'Activité de la Bretèche Bâtiment O 35760 SAINT GREGOIRE Téléphone : 02 23 25 03 30 Télécopie : 02 23 25 03 33	10 Place Charles Béraudier 69428 LYON Cedex 03 Téléphone : 04 72 11 46 94 Télécopie : 04 72 11 46 96	Centre d'affaires Off-Shore Aéropôle 1 - 5 Avenue Albert Durand 31700 BLAGNAC Téléphone : 05 61 31 62 91 Télécopie : 05 61 31 62 91

Historique du document

Version	Date	Auteur	Description
A.01	20/08/2007	Jean-François LAVERGNE	Création du document.
B.01	24/01/2008	Jean-François LAVERGNE	Mise à jour du document suite à la recette du 10/01/2008.

Sommaire

Chapitre 1 Introduction 5
1.1 Objet du document 5
1.2 Personnes concernées 5
1.3 Bibliographie 5
1.3.1 Documents de CEA 5
1.3.2 Documents de Quartz Data - Groupe Alyotech 5
1.4 Abréviations 5
1.4.1 Sigles généraux 5
1.4.2 Sigles des documents 6

Chapitre 2 Objectifs du logiciel 7
2.1 Présentation générale 7
2.2 But de l'application 7
2.3 Description de l'application réalisée 7

Chapitre 3 Composants de la livraison 9

Chapitre 4 Installation du logiciel 11
4.1 Installation de Matlab sur le poste utilisateur 11
4.2 Installation de l'application sur le poste utilisateur 12

Chapitre 5 Utilisation de l'application 13
5.1 Lancement de l'application 13
5.1.1 sur un poste utilisateur avec MATLAB installé en configuration 1 (donc avec Matlab Complet). 13
5.1.2 sur un poste utilisateur avec MATLAB installé en configuration 2 (donc avec Matlab en version runtime). 15
5.2 Ouverture du fichier de données 16
5.3 Traitement du fichier de données d'entrée 20
5.3.1 Ecran de visualisation 20
5.3.2 Traitement et affichage des fonctions d'ajustement 21
5.4 Utilisation des outils de visualisation et d'impression 26

5.4.1 Outils de visualisation 26
5.4.2 Outils d'impression 30
5.5 Utilisation des données d'entrée 31
5.5.1 Modifications des données d'entrée 31
5.5.2 Ajout de points calculés 33
5.6 Quitter l'application 34

Chapitre 1 Introduction

1.1 Objet du document

Le présent document contient le Manuel d'Utilisation du logiciel Spectrométrie GAMMA. Ce logiciel est développé par Quartz Data - Groupe Alyotech pour le compte du CEA dans le cadre du projet Spectrométrie GAMMA.

Ce document est construit de telle manière qu'il doit contenir l'ensemble des informations nécessaires à l'utilisation et à l'installation du logiciel.

1.2 Personnes concernées

Le présent document est :

- rédigé par Quartz Data - Groupe Alyotech
- contrôlé et validé par Quartz Data - Groupe Alyotech
- contrôlé et validé par CEA.

Il est appliqué par les intervenants du CEA pour utiliser le logiciel Spectrométrie GAMMA.

1.3 Bibliographie

1.3.1 Documents de CEA

[CC] Cahier des charges préliminaire pour un programme d'ajustement des courbes de rendement
Mail du 18 Juillet 2006

1.3.2 Documents de Quartz Data - Groupe Alyotech

[DR] Dossier de Réponse
200608F15B01-DR003-Proposition technique et financière – Spectrométrie Gamma

[DSL] Dossier de spécification logiciel
200608F15-DSL00X-Dossier de spécification logiciel – Spectrométrie Gamma

1.4 Abréviations

1.4.1 Sigles généraux

CEA Commissariat à l'Energie Atomique
QDS Quartz Data Solution
IHM Interface Homme / Machine

1.4.2 Sigles des documents

CC	Cahier des Charges
DR	Dossier de Réponse
DSL	Manuel d'Utilisation
MU	Manuel d'Utilisation

Chapitre 2 Objectifs du logiciel

2.1 Présentation générale

Un spectromètre gamma est un appareil qui permet d'une part de mesurer l'énergie des photons gamma émis et d'autre part d'en comptabiliser le nombre pendant une certaine durée.
Les données expérimentales obtenues par le spectromètre seront l'objet de nombreuses études.
Le logiciel d'ajustement des courbes de rendement permet l'affichage et le traitement de ces données.

2.2 But de l'application

Le logiciel a pour but de trouver une fonction mathématique qui permet de se rapprocher au mieux d'une série de points expérimentaux qui sont des valeurs du *rendement* associé à une *énergie*.
Cette fonction va être ensuite utilisée pour calculer des valeurs de rendement pour des énergies fournies par l'utilisateur.

2.3 Description de l'application réalisée

Le logiciel assure les fonctionnalités suivantes :

1. Chargement des données expérimentales, à partir d'un fichier Excel, dans des tableaux et les afficher.
2. Visualisation des données expérimentales.
3. Choix du mode d'ajustement.
4. Détermination de la fonction d'ajustement.
5. Visualisation des données calculées en utilisant la fonction d'ajustement trouvée.
6. Calcul des valeurs de rendement pour des énergies fournies par l'utilisateur.
7. Sauvegarde des résultats.
8. Relecture des résultats sauvegardés.

La figure 1 présente les fonctionnalités de l'application réalisée.

L'application est réalisée avec l'environnement de développement Matlab et le logiciel Microsoft Excel, qui sont utilisés pour :

- la lecture des fichiers d'entrée,
- les traitements intermédiaires,
- l'exportation des données.

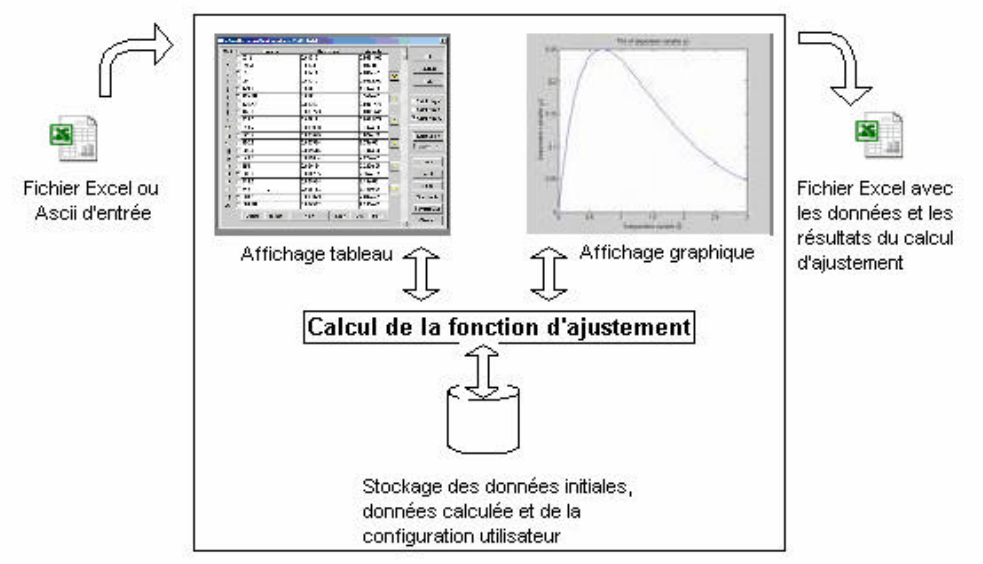


Figure 1 : Synoptique de l'application

Chapitre 3 Composants de la livraison

La figure 2 ci-dessous présente le contenu du CD de livraison fourni par Quartz Data - Groupe Alyotech.

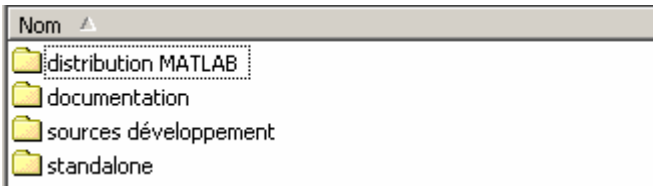


Figure 2 : Contenu de la livraison

Le détail du contenu de cette distribution est le suivant :

*Répertoire « **distribution MATLAB** » :*

Ce répertoire contient la distribution gratuite «runtime » de MATLAB. Elle sera à installer sur un poste nécessitant uniquement la runtime MATLAB.

Ce répertoire contient le fichier « MCRInstaller.exe ».

Figure 3 : Contenu du répertoire « distribution MATLAB »

*Répertoire « **documentation** » :*

Ce répertoire contient la documentation écrite dans le cadre de ce projet. Ce répertoire contient :

- le cahier des charges émis par le CEA,
- le document de spécification du logiciel écrit par Quartz Data - Groupe Alyotech,
- le manuel d'installation et d'utilisation du logiciel développé par Quartz Data - Groupe Alyotech,

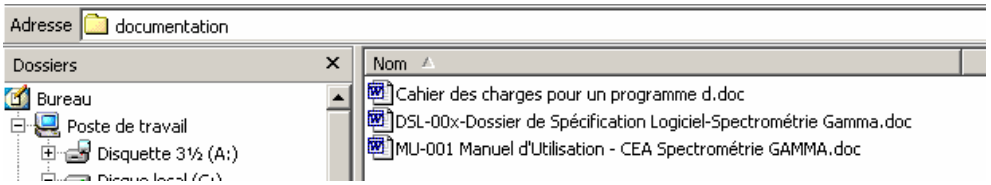


Figure 4 : Contenu du répertoire « documentation »

*Répertoire « **standalone** » :*

Ce répertoire contient la distribution de l'application développée par Quartz Data - Groupe Alyotech et compilée avec le compilateur MATLAB.

C'est cette application qui est à lancer par l'utilisateur. L'éxécutable à lancer est « .\standalone\distrib\standalone.exe ».

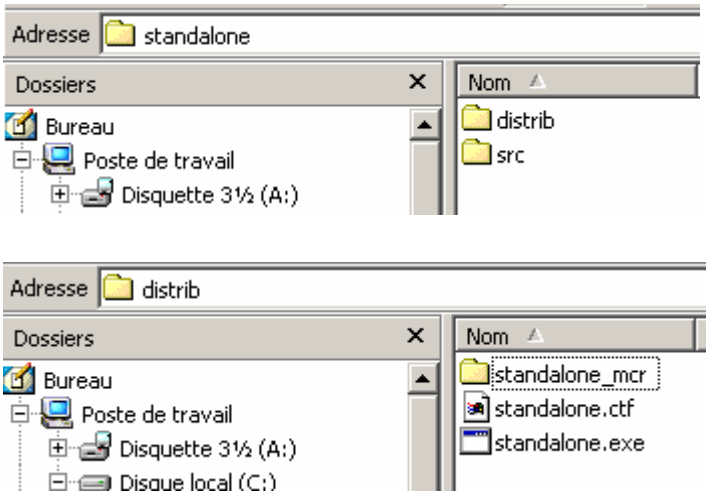


Figure 4 : Contenu du répertoire « standalone »

*Répertoire « **sources développement** » :*

Ce répertoire contient les sources MATLAB de l'application développée par Quartz Data - Groupe Alyotech. Les sources livrés sont les suivants :

- ***cea_gamma.m*** : correspond au module principal de l'application,
- ***cea_calcule_rendement.m*** : correspond à la fonction de calcul du rendement pour une énergie donnée,
- ***cea_calcule_incertitude.m*** : correspond au calcul de l'incertitude pour l'ensemble des points des données brutes,
- ***cea_ajustement.m*** : correspond au calcul de la fonction d'ajustement sélectionnée,
- ***deployprint.m*** : correspond au module qui vient en remplacement de celui livré avec Matlab $MATLAB_ROOT\toolbox\compiler\deploy\deployprint.m (qui présente un bug de fonctionnement),
- ***cea_gamma (V5).xls***: correspond à un exemple de fichier d'entrée de données au format Excel, utilisée par l'application.

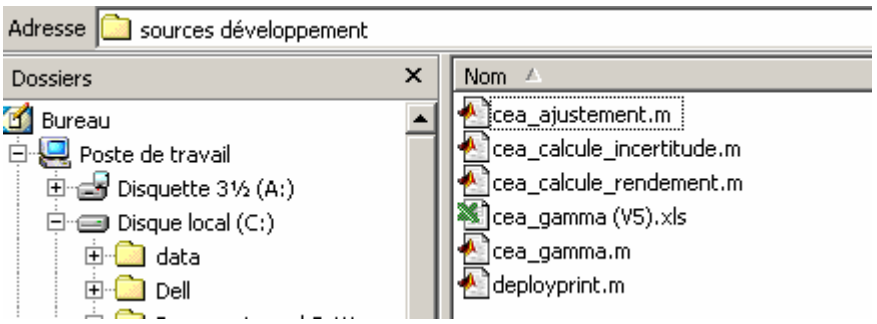


Figure 5 : Contenu du répertoire « sources développement »

Chapitre 4 Installation du logiciel

Ce chapitre décrit la procédure d'installation du logiciel sur un poste de type PC Windows.

Ce poste peut fonctionner sous Windows 2000 ou Windows XP.

Le poste utilisé doit être installé dans une des 2 configurations suivantes :

- Configuration 1 : Matlab complet en version de développement (version 2006b minimum) installé sur le poste,
- Configuration 2: Runtime Matlab (version 2006b minimum) installé sur le poste.

En configuration 1, l'utilisation de Matlab sur le poste nécessite de disposer d'une licence Matlab valide en version R2006b minimum.

En configuration 2, l'utilisation de la runtime Matlab ne nécessite pas l'utilisation d'une licence. La Runtime Matlab est contenue avec le CD de livraison fourni par Quartz Data - Groupe Alyotech.

La Runtime est nommée « MCRInstaller.exe ».

Dans les 2 configurations possibles, Microsoft Excel doit être installé sur le poste utilisateur.

4.1 Installation de Matlab sur le poste utilisateur

L'installation de Matlab doit être effectuée sur le poste utilisé par l'application.

L'installation de Matlab doit être effectuée dans une des 2 configuration décrites ci-dessus (configuration 1 : Matlab en version complète ; configuration 2 : Matlab en versions Runtime).

L'installation de Matlab doit être effectuée une seule fois pour chaque poste utilisé. Elle est effectuée en utilisant l'assistant d'installation proposée au lancement de l'installation.

Pendant l'installation de Matlab, l'utilisateur effectuera les choix standards proposés par l'assistant d'installation.

Installation de Matlab en configuration 1 :

Pour faire cette installation, l'utilisateur doit disposer des CD d'installation de MATLAB en version R2006b minimum. Ces CD sont fournies par Mathworks.

L'utilisateur doit être en possession d'une licence valide fournie par Mathworks. (licence appelée PLP)

L'installation est effectuée en introduisant le CD1 d'installation de MATLAB dans le lecteur de CD ou DVD. L'installation est ensuite lancée automatiquement.

L'installation sera effectuée en utilisant tous les choix par défaut proposés par l'outil d'installation et en utilisant la licence PLP fournie par Mathworks.

Installation de Matlab en configuration 2 :

Cette installation consiste à équiper un poste utilisateur d'une version runtime de Matlab. L'utilisation d'une runtime Matlab est gratuite et ne nécessite pas l'utilisation de licence PLP.

La distribution de la version Matlab correspondant à la version R2006b se trouve sur le CD de livraison fourni par Quartz Data - Groupe Alyotech. Sa localisation est « \distribution MATLAB\MCRInstaller.exe ».

Pour lancer l'installation, double-cliquez sur le nom de l'exécutable et l'installation se lance automatiquement.

L'installation sera effectuée en utilisant tous les choix par défaut proposés par l'outil d'installation.

Cette installation utilise une version runtime de Matlab qui est gratuite.

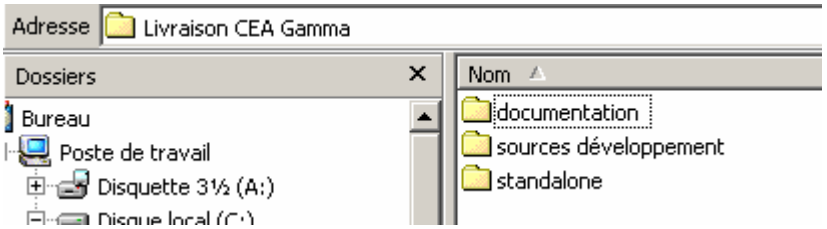
Remarque	Sur un même poste utilisateur les 2 configurations de MATLAB (version MATLAB complet (configuration 1) et runtime MATLAB (configuration 2)) peuvent être installées sans que cela pose des problèmes de compatibilité ou de fonctionnement.

4.2 Installation de l'application sur le poste utilisateur

L'installation de l'application consiste à copier les 3 répertoires suivants de la livraison sur le poste utilisateur :

- documentation,
- sources développement,
- standalone.

L'installation peut être effectuée à n'importe quel endroit de l'arborescence du poste utilisateur.



Chapitre 5 Utilisation de l'application

Ce chapitre détaille l'utilisation de l'application ayant fait l'objet des développements demandés par le CEA.

5.1 Lancement de l'application

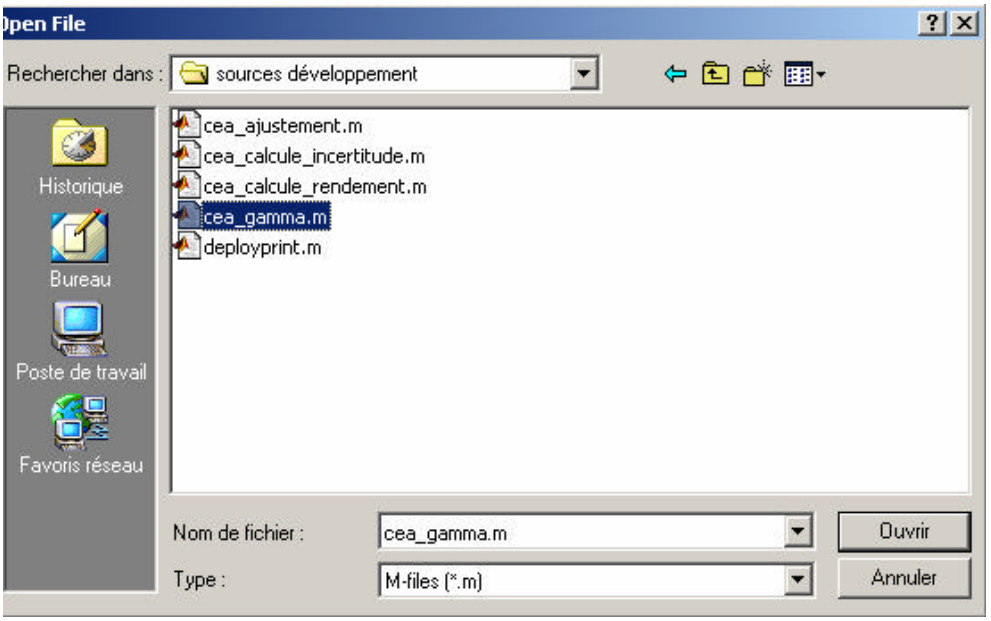
Le lancement de l'application peut-être effectuée d'une des 2 façons suivantes :

5.1.1 sur un poste utilisateur avec MATLAB installé en configuration 1 (donc avec Matlab Complet).

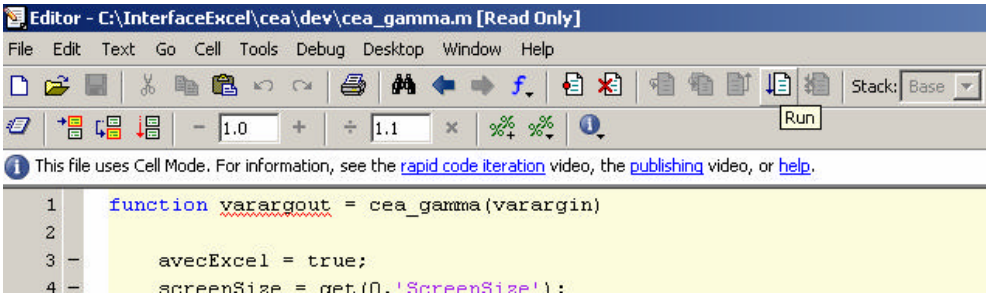
- lancer le logiciel MATLAB avec le bouton démarrer « Demarrer->Programmes->MATLAB->R2006b->MATLAB R2006b »

- lancer l'éditeur Matlab, dans l'application Matlab :

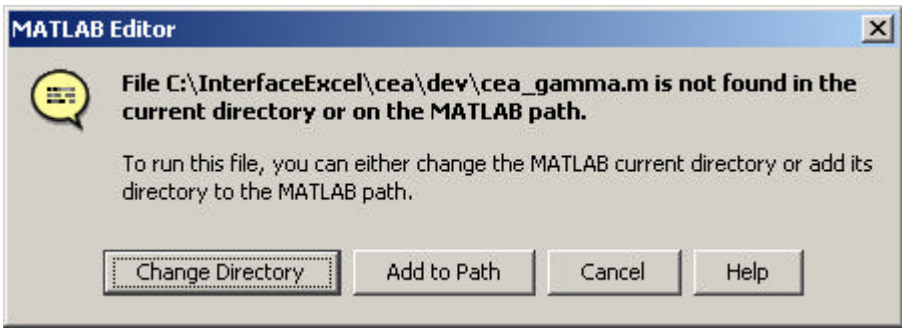
- dans l'éditeur Matlab, ouvrir le source du module principal de l 'application « cea_gamma.m » :



- une fois le fichier source ouvert dans l'éditeur, l'application peut être lancée à partir du bouton « Run » dans l'éditeur, comme précisé sur la figure ci-dessous :


Editor - C:\InterfaceExcel\cea\dev\cea_gamma.m [Read Only]
File Edit Text Go Cell Tools Debug Desktop Window Help
Stack: Base
Run
This file uses Cell Mode. For information, see the rapid code iteration video, the publishing video, or help.
function varargout = cea_gamma(varargin)
avecExcel = true;

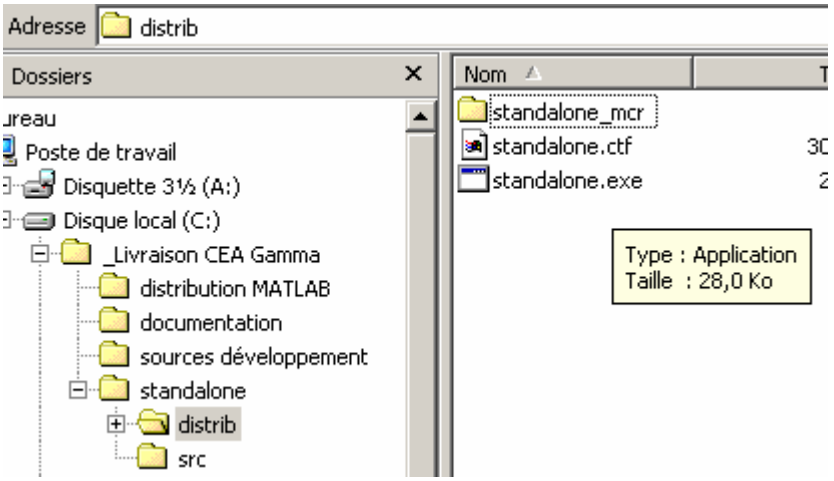
- lorsque le message suivant apparaît à l'écran, choisir l'option « Change directory »:


MATLAB Editor
File C:\InterfaceExcel\cea\dev\cea_gamma.m is not found in the current directory or on the MATLAB path.
To run this file, you can either change the MATLAB current directory or add its directory to the MATLAB path.
Change Directory
Add to Path
Cancel
Help

- **et ensuite l'application est lancée**

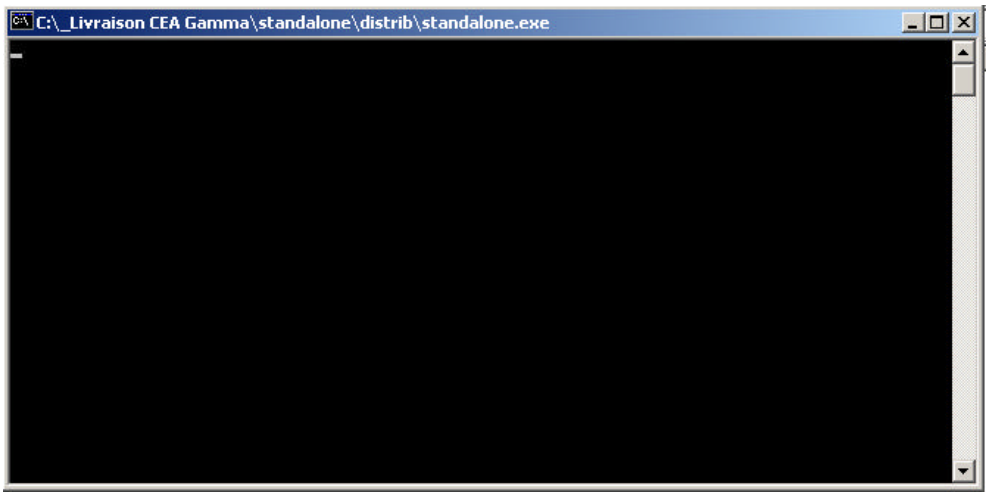
5.1.2 sur un poste utilisateur avec MATLAB installé en configuration 2 (donc avec Matlab en version runtime).

- se positionner dans le répertoire suivant « <racine_distribution>\standalone\distrib » de la distribution de MATLAB installée sur le poste utilisateur :



- lancer l'application en double-cliquant sur l'exécutable « standalone.exe ». Le lancement de l'application peut-être effectué en utilisant un raccourci sur le bureau. Ce raccourci aura été préalablement positionné sur le bureau et paramétré de telle façon à pointer vers le chemin de l'exécutable à lancer.

- la fenêtre DOS suivante apparaît ensuite à l'écran :



- **<u>et ensuite l'application est lancée</u>**

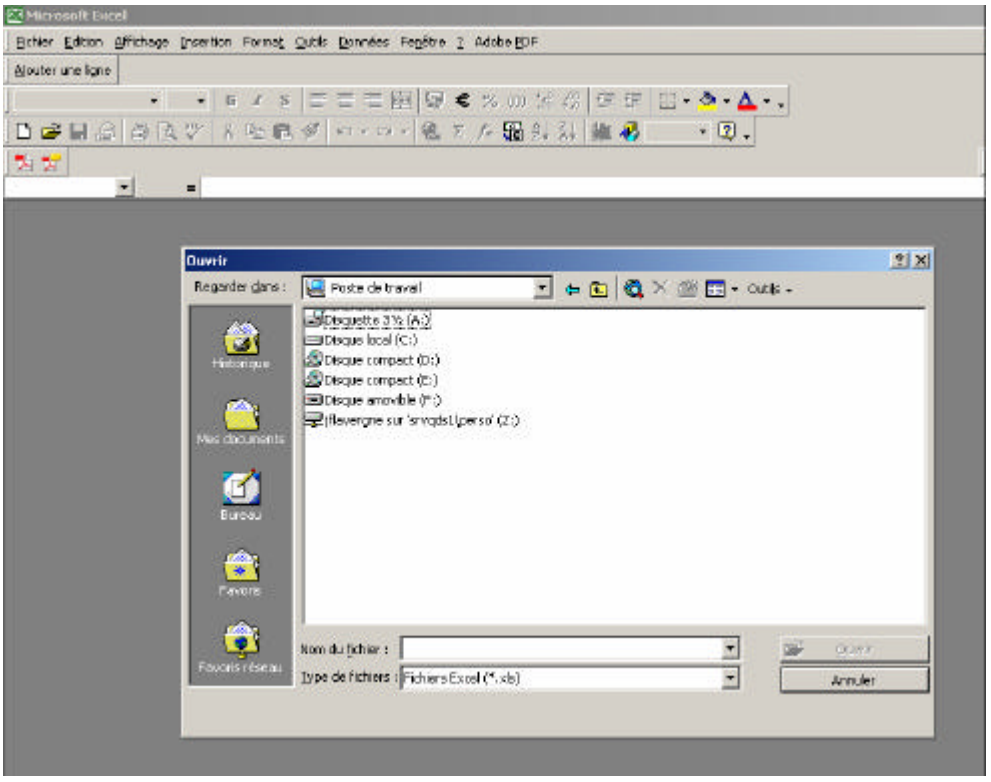
Remarque Pour un poste équipé de MATLAB installé en configuration 1 uniquement (MATLAB complet), le lancement de l'application peut être effectué uniquement en configuration 1.

Remarque Pour un poste équipé de MATLAB installé en configuration 2 uniquement (runtime MATLAB), le lancement de l'application peut être effectué uniquement en configuration 2.

Remarque Pour un poste équipé de MATLAB installé avec les 2 configurations 1 et 2 (runtime MATLAB et MATLAB complet), le lancement de l'application peut être effectué indifféremment en configuration 1 ou 2. Il n'y a aucune incompatibilité à installer MATLAB dans les 2 configurations sur le même poste.

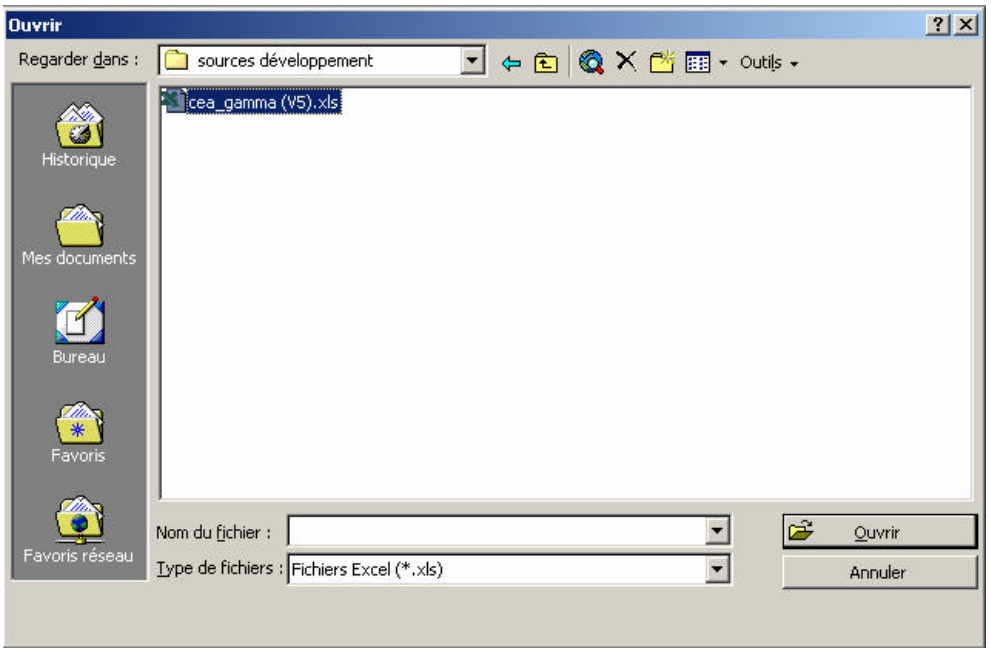
5.2 Ouverture du fichier de données

Après lancement de l'application, la fenêtre suivante apparaît à l'écran.



Cette fenêtre montre que Excel a été lancé en arrière-plan et que l'application invite l'utilisateur à choisir un fichier Excel. Ce fichier correspond au fichier de données d'entrée à traiter par l'application.

Il n'y a aucune contrainte sur le chemin du fichier Excel à prendre en compte. Le chemin du fichier Excel doit être sélectionné par l'utilisateur en utilisant la boîte de dialogue précédente. Un exemple de choix est donné sur la figure ci-dessous :

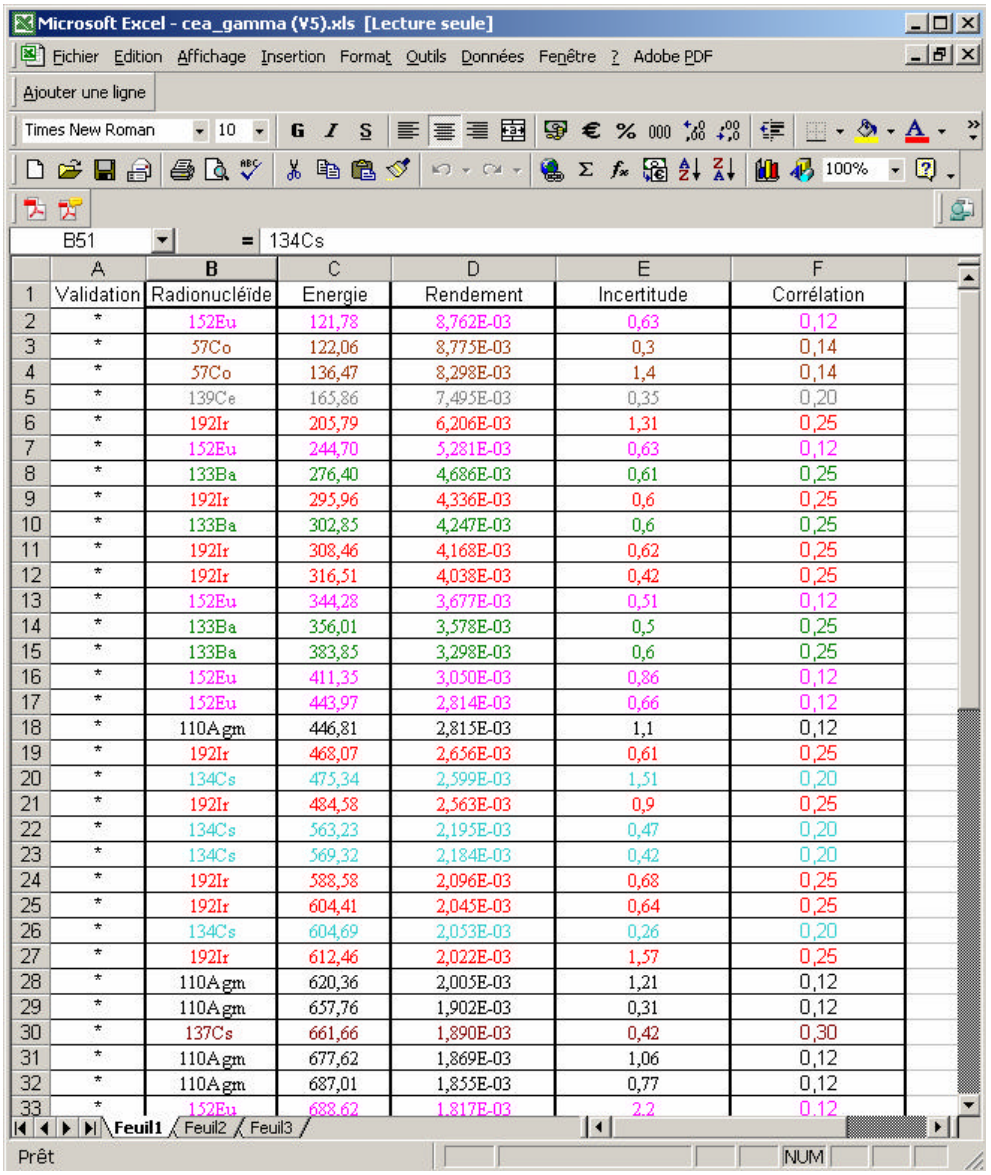


Après sélection du fichier d'entrée, celui-ci est pris en compte après action sur le bouton « Ouvrir ».

Remarque : format du fichier d'entrée.

Le fichier d'entrée est un fichier Excel qui a été renseigné de la façon suivante :

Constitution de l' Onglet « Feuil1 »


Microsoft Excel - cea_gamma (V5).xls [Lecture seule]
Fichier Edition Affichage Insertion Format Outils Données Fenêtre ? Adobe PDF
Ajouter une ligne
Times New Roman 10
B51 = 134Cs
Feuil1 Feuil2 Feuil3
Prêt
NUM

	A	B	C	D	E	F
1	Validation	Radionucléïde	Energie	Rendement	Incertitude	Corrélation
2	*	152Eu	121,78	8,762E-03	0,63	0,12
3	*	57Co	122,06	8,775E-03	0,3	0,14
4	*	57Co	136,47	8,298E-03	1,4	0,14
5	*	139Ce	165,86	7,495E-03	0,35	0,20
6	*	192Ir	205,79	6,206E-03	1,31	0,25
7	*	152Eu	244,70	5,281E-03	0,63	0,12
8	*	133Ba	276,40	4,686E-03	0,61	0,25
9	*	192Ir	295,96	4,336E-03	0,6	0,25
10	*	133Ba	302,85	4,247E-03	0,6	0,25
11	*	192Ir	308,46	4,168E-03	0,62	0,25
12	*	192Ir	316,51	4,038E-03	0,42	0,25
13	*	152Eu	344,28	3,677E-03	0,51	0,12
14	*	133Ba	356,01	3,578E-03	0,5	0,25
15	*	133Ba	383,85	3,298E-03	0,6	0,25
16	*	152Eu	411,35	3,050E-03	0,86	0,12
17	*	152Eu	443,97	2,814E-03	0,66	0,12
18	*	110Agm	446,81	2,815E-03	1,1	0,12
19	*	192Ir	468,07	2,656E-03	0,61	0,25
20	*	134Cs	475,34	2,599E-03	1,51	0,20
21	*	192Ir	484,58	2,563E-03	0,9	0,25
22	*	134Cs	563,23	2,195E-03	0,47	0,20
23	*	134Cs	569,32	2,184E-03	0,42	0,20
24	*	192Ir	588,58	2,096E-03	0,68	0,25
25	*	192Ir	604,41	2,045E-03	0,64	0,25
26	*	134Cs	604,69	2,053E-03	0,26	0,20
27	*	192Ir	612,46	2,022E-03	1,57	0,25
28	*	110Agm	620,36	2,005E-03	1,21	0,12
29	*	110Agm	657,76	1,902E-03	0,31	0,12
30	*	137Cs	661,66	1,890E-03	0,42	0,30
31	*	110Agm	677,62	1,869E-03	1,06	0,12
32	*	110Agm	687,01	1,855E-03	0,77	0,12
33	*	152Eu	688,62	1,817E-03	2,2	0,12

L'onglet « Feuil1 » du fichier possède obligatoirement une première ligne qui représente l'entête du fichier. Cette entête est constituée des informations suivantes :

- Colonne 1 : « Validation »
- Colonne 2 : « Radionucléïde »
- Colonne 3 : « Energie »
- Colonne 4 : « Rendement »
- Colonne 5 : « Incertitude »
- Colonne 6 : « Corrélation ».

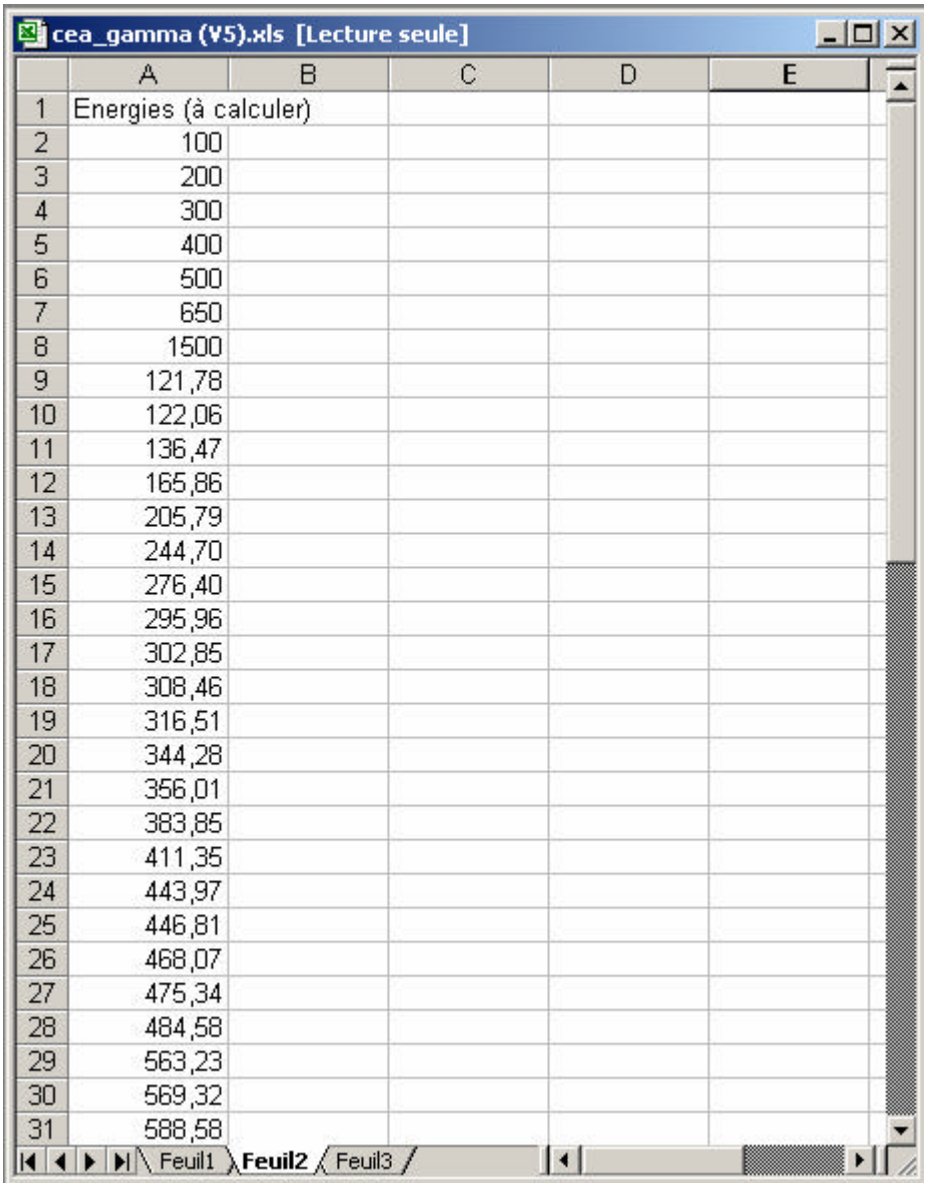
Les données à traiter par l'application se situent sur les lignes suivant l'entête sur l'onglet « Feuil1 ». Ces données représentent les informations suivantes :

- Colonne 1 : 2 valeurs possibles : « * » ou «cellule vide ». Lorsque la cellule contient une « * », les données de la ligne seront prises en compte dans les

traitements. Si cette cellule est vide, les données ne seront par prises en compte dans les traitements ;

- Colonne 2 : Nom = Nom du radionucléïde correspondant aux données de la ligne,
- Colonne 3 : E = Energie du radionucléïde correspondant aux données de la ligne,
- Colonne 4 : R = Rendement du radionucléïde correspondant aux données de la ligne,
- Colonne 5 : I = Incertitude de mesure du radionucléïde correspondant aux données de la ligne,
- Colonne 6 : C = corrélation de mesure du radionucléïde correspondant aux données de la ligne,

Constitution de l' Onglet « Feuil2 »



	A	B	C	D	E
1	Energies (à calculer)				
2	100				
3	200				
4	300				
5	400				
6	500				
7	650				
8	1500				
9	121,78				
10	122,06				
11	136,47				
12	165,86				
13	205,79				
14	244,70				
15	276,40				
16	295,96				
17	302,85				
18	308,46				
19	316,51				
20	344,28				
21	356,01				
22	383,85				
23	411,35				
24	443,97				
25	446,81				
26	468,07				
27	475,34				
28	484,58				
29	563,23				
30	569,32				
31	588,58				

L'onglet « Feuil2 » du fichier possède obligatoirement une première ligne qui représente l'entête du fichier. Cette entête est constituée des informations suivantes :

- Colonne 1 : « Energies à calculer »

Les données à traiter par l'application se situent sur les lignes suivant l'entête sur l'onglet « Feuil2 ». Ces données représentent les informations suivantes :

- Colonne 1 : valeurs des énergies à calculer. Cette liste fournit l'ensemble des valeurs d'énergie pour lesquelles l'application doit calculer les rendements en utilisant le polynôme d'ajustement obtenu par traitement.

5.3 Traitement du fichier de données d'entrée

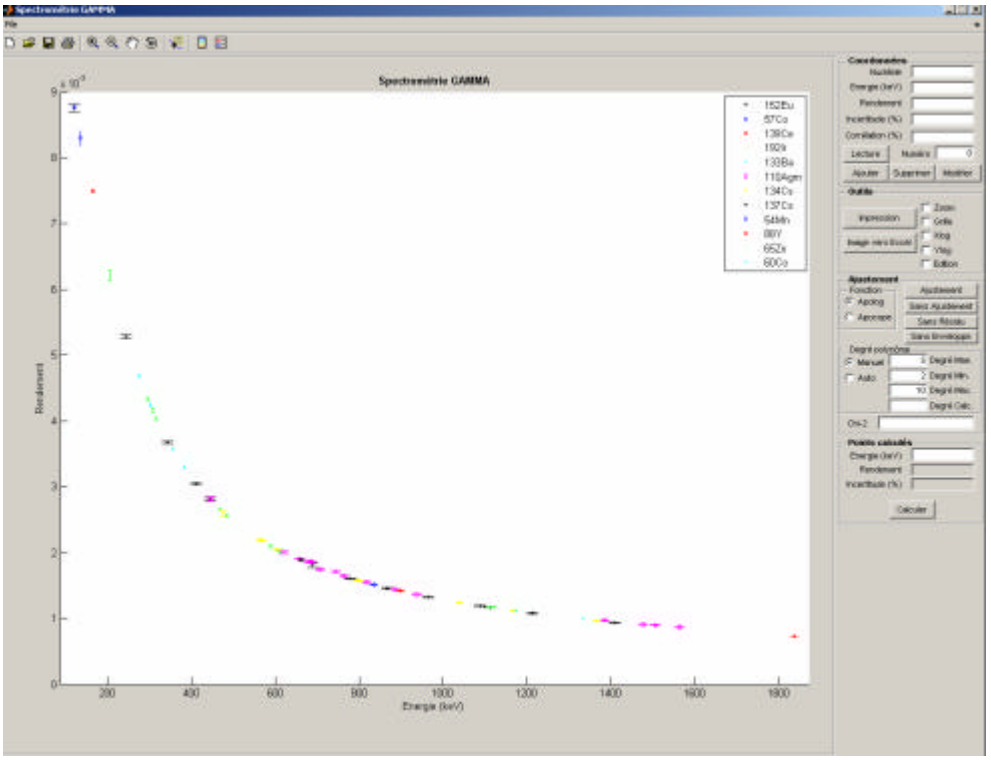
5.3.1 Ecran de visualisation

Après sélection du fichier d'entrée, l'application ouvre automatiquement 2 fichiers Excel :

- le fichier Excel d'entrée dont le contenu est détaillé au chapitre précédent,
- le fichier Excel de sortie qui contiendra l'ensemble des résultats de traitement obtenus (coefficient du polynome d'ajustement, paramètres utilisés pour l'ajustement, énergie et rendement calculés, …). Ce fichier sera renseigné au cours des traitements et lorsque l'utilisateur quittera l'application.

et lance automatiquement les traitements et la visualisation.

L'écran de visualisation et de traitement suivant apparaît donc à l'écran :

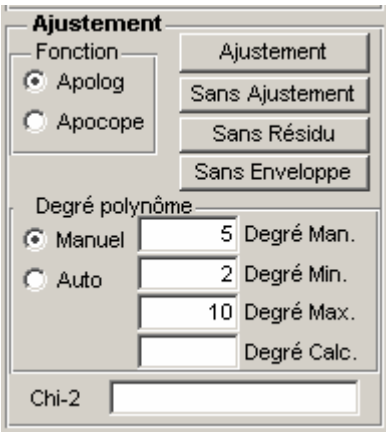


Cet écran fait apparaître 2 zones distinctes :

- une zone de tracé de courbes, sur la gauche de l'écran. Sur cette zone, on obtient un tracé Y=F(X) correspondant au tracé du rendement en fonction de l'énergie pour l'ensemble des points validés du fichier d'entrée. Autour de chaque point est tracé un segment de droite en Y dont l'amplitude correspond à la valeur (R*I)/100 du point,
- une zone de saisie de paramètres ou de boutons de choix sur la droite de l'écran.

5.3.2 Traitement et affichage des fonctions d'ajustement

Le calcul et l'affichage de la fonction d'ajustement sont déclenchés en utilisant les paramètres situés dans le groupe d'objet « Ajustement » de l'écran comme présenté ci-dessous :



Les paramètres de l'écran ci-dessus ont les fonctions ou les significations suivantes :

Groupe « Fonction » :

Cette liste de choix permet de sélectionner le type de fonction d'ajustement à utiliser.

Choix possible : *Apolog* / *Apocope*

Le choix est positionné par défaut sur la fonction *Apolog*

Groupe « Degré polynome » :

Ce groupe de paramètres permet de sélectionner les paramètres du polynôme d'ajustement à trouver.

2 types de calcul du polynôme d'ajustement sont possibles : *Manuel* ou *Automatique*. Le choix est positionné par défaut sur le mode *Manuel*.

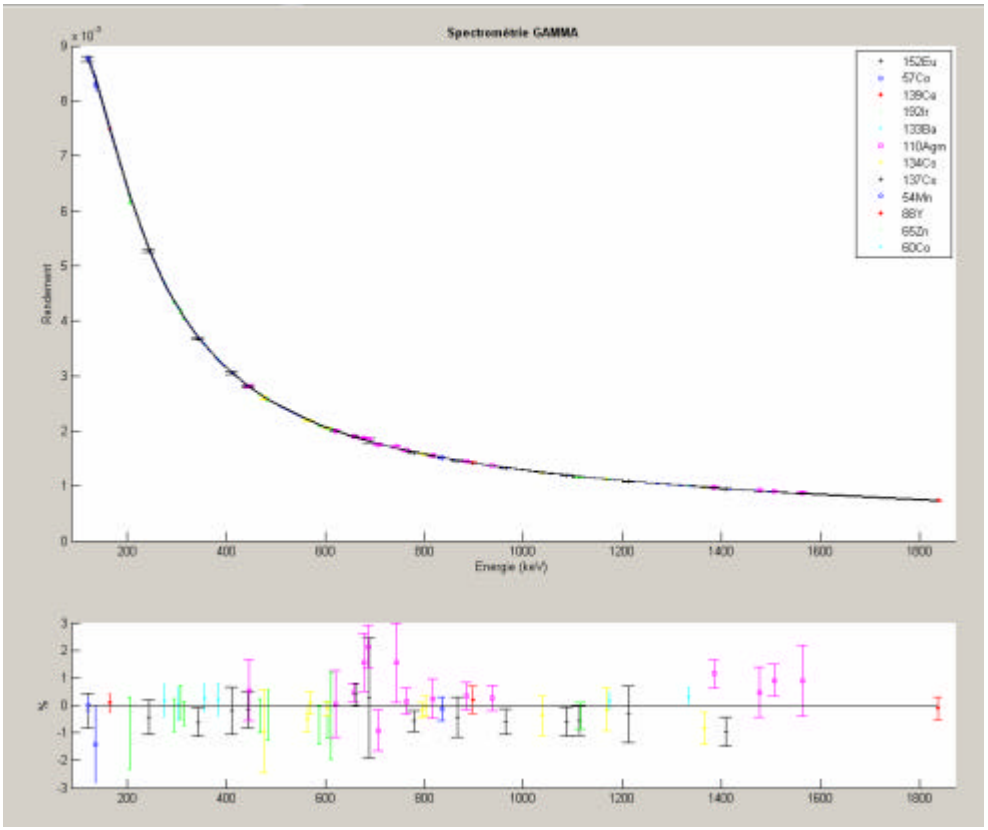
Choix *Manuel* : l'utilisateur doit dans ce cas renseigner la valeur du polynôme d'ajustement à utiliser dans la zone de saisie *Degré Man*. La valeur par défaut renseignée pour le degré manuel est *5*.

Choix *Auto* : l'utilisateur doit dans ce cas renseigner les valeurs minimum et maximum du polynôme à chercher automatiquement dans les zones de saisie *Degré Min* et *Degré Max*.. La valeur par défaut renseignée pour le degré min est *2* et pour le degré max est *10*.

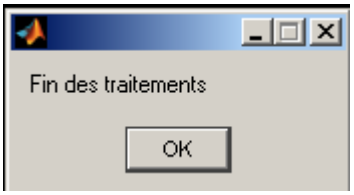
Bouton « *Ajustement* »

Une action sur le bouton *Ajustement* déclenche le calcul des paramètres du polynôme d'ajustement (coefficients et degré du polynôme, calcul du Chi-2 et calcul des rendements calculés).

Après ajustement, l'écran de visualisation est actualisé automatiquement de la façon suivante :



En fin de traitement, le message suivant apparaît :



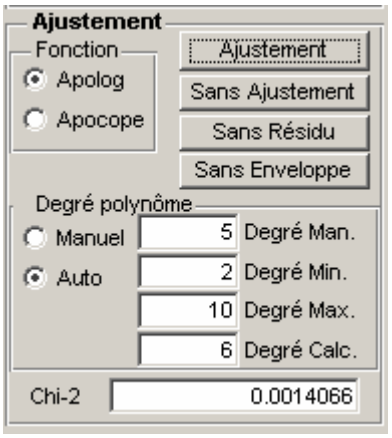
Sur le tracé de la courbe Energie=f(Rendement) apparaît maintenant le tracé de la courbe correspondant au polynôme d'ajustement accompagnée des 2 courbes constituant les enveloppes autour du polynôme.

Au dessous du tracé Energie=f(Rendement) apparaît également le tracé de la courbe des résidus accompagnés de leurs incertitudes.

En mode *Auto*, lorsque le polynôme d'ajustement a été déterminé, l'application renseigne automatiquement la zone d'informations *Degré Calc* du groupe « degré polynôme » avec la valeur du degré du polynôme obtenu.

En mode *Manuel* ou *Auto*, lorsque le polynôme d'ajustement a été déterminé, l'application renseigne automatiquement la zone d'informations *Chi-2* avec la valeur du chi-2 correspondant au polynôme obtenu.

Un exemple de résultat obtenu pour un calcul en mode auto est présenté sur la figure ci-dessous :



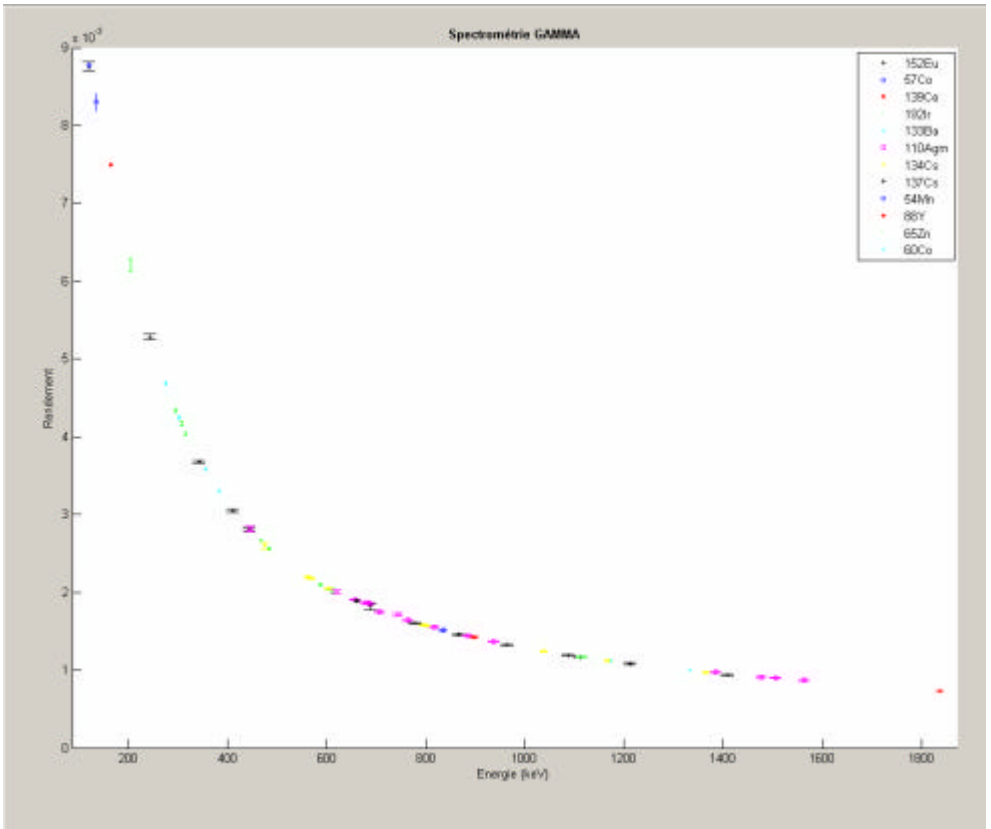
Bouton « *Sans Ajustement* »

Une action sur le bouton *Sans Ajustement* supprime le calcul des paramètres du polynôme d'ajustement (coefficients et degré du polynôme, calcul du Chi-2 et calcul des rendements calculés).

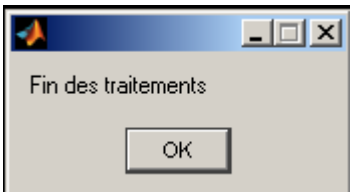
Les écrans de visualisation des tracés sont modifiés de la façon suivante :

- la courbe des résidus est supprimée
- sur le tracé de la courbe Energie=f(Rendement) le tracé de la courbe correspondant au polynôme d'ajustement et son enveloppe est supprimé.

Le résultat obtenu est le suivant :



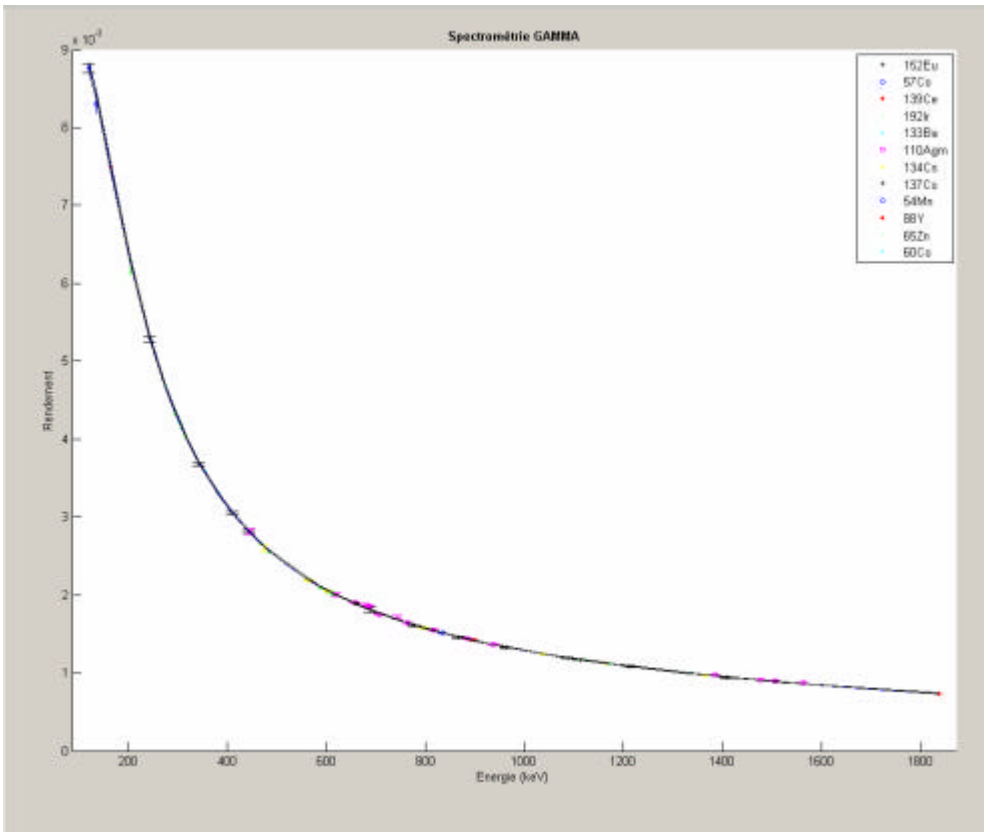
En fin de traitement, le message suivant apparaît :



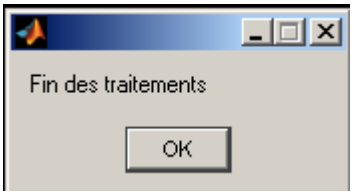
Bouton « *Sans Résidu* »

Une action sur le bouton *Sans Résidu* supprime l'écran de visualisation de la courbe des résidus.

Le résultat obtenu est le suivant :



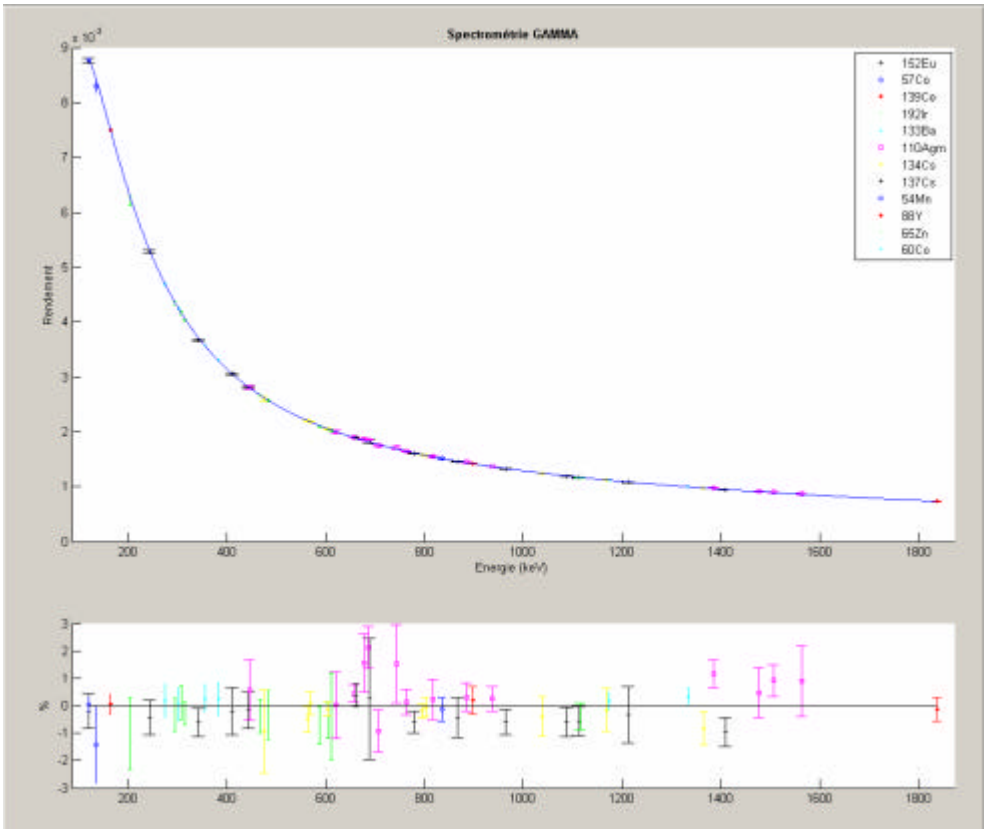
En fin de traitement, le message suivant apparaît :



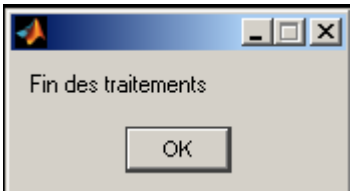
Bouton « *Sans Enveloppe* »

Une action sur le bouton *Sans Enveloppe* supprime la visualisation des courbes enveloppe associées à la courbe correspondant au polynôme d'ajustement.

Le résultat obtenu est le suivant :



En fin de traitement, le message suivant apparaît :



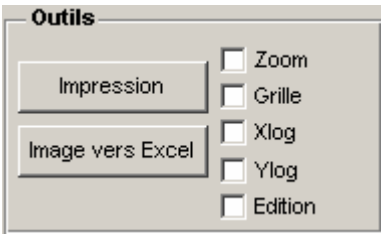
5.4 Utilisation des outils de visualisation et d'impression

5.4.1 Outils de visualisation

Les outils de visualisation correspondent aux options proposées dans le groupe d'objets « ***Outils*** ».

Ces outils permettent de modifier la présentation des données et des courbes affichées sur la zone de visualisation des courbes.

Le groupe d'objet « ***Outils*** » est présenté ci-dessous :



Choix « *Zoom* »

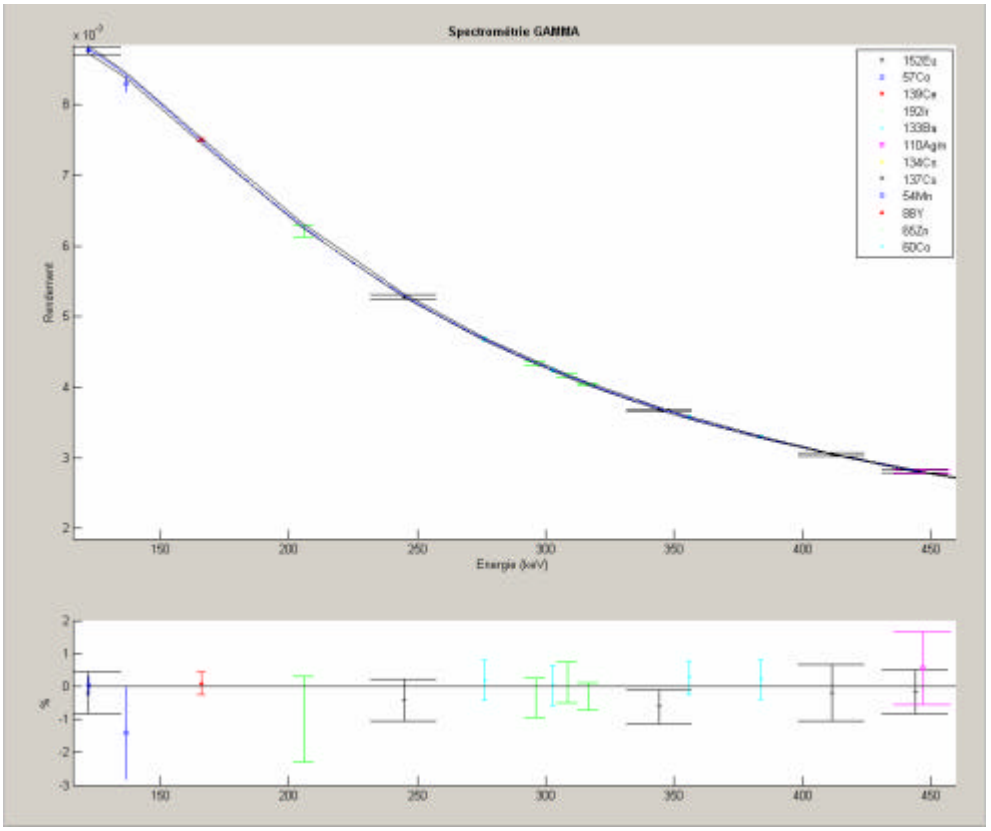
Après avoir coché le choix *Zoom*, l'utilisateur peut effectuer des zooms sur la zone de tracés. Les zooms effectués sur l'axe des X sont automatiquement effectués sur les courbes de rendement et des résidus avec le même facteur d'échelle.

Le zoom est effectué en sélectionnant avec la souris des zones de zooms sur l'écran.

La fonction de retour arrière sur le zoom est obtenu en double cliquant sur la zone de tracé.

La fonction zoom est dévalidée en décochant le choix *Zoom*.

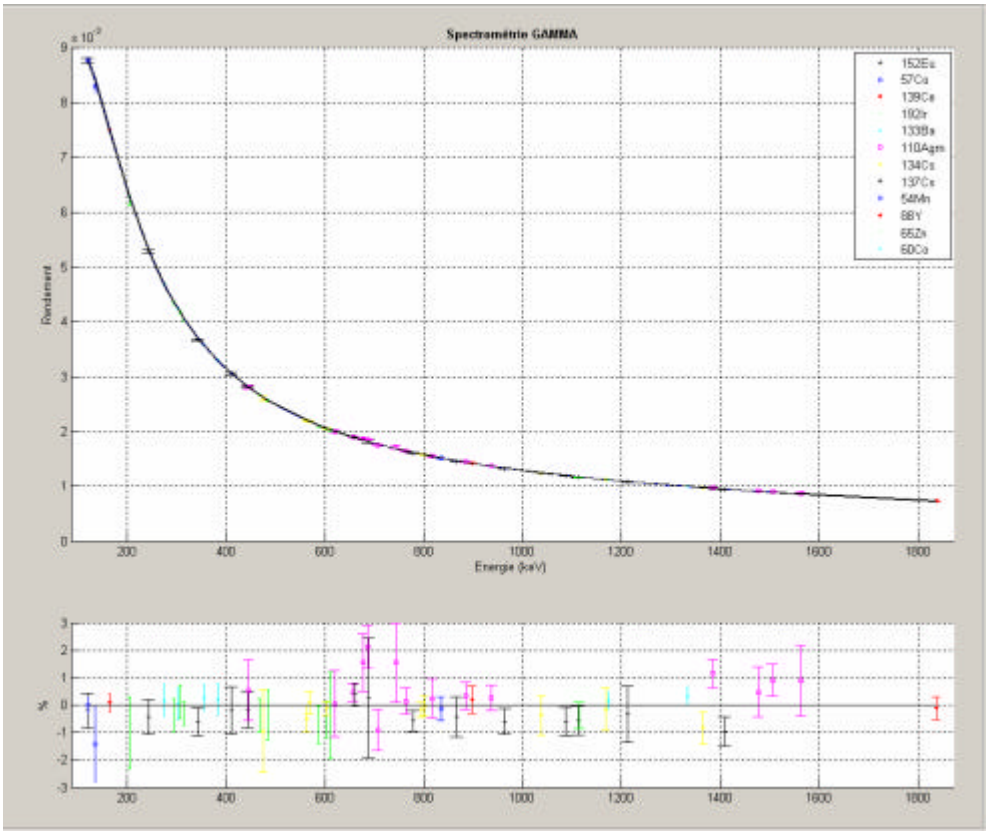
Un exemple de la zone de tracé après zoom est présenté ci-dessous :



Choix « *Grille* »

Après avoir coché le choix *Grille*, une grille en abscisse et ordonnées est affichée sur les zones de tracés comme présentée sur la figure ci-dessous.

La fonction grille est dévalidée en décochant le choix *Grille*.



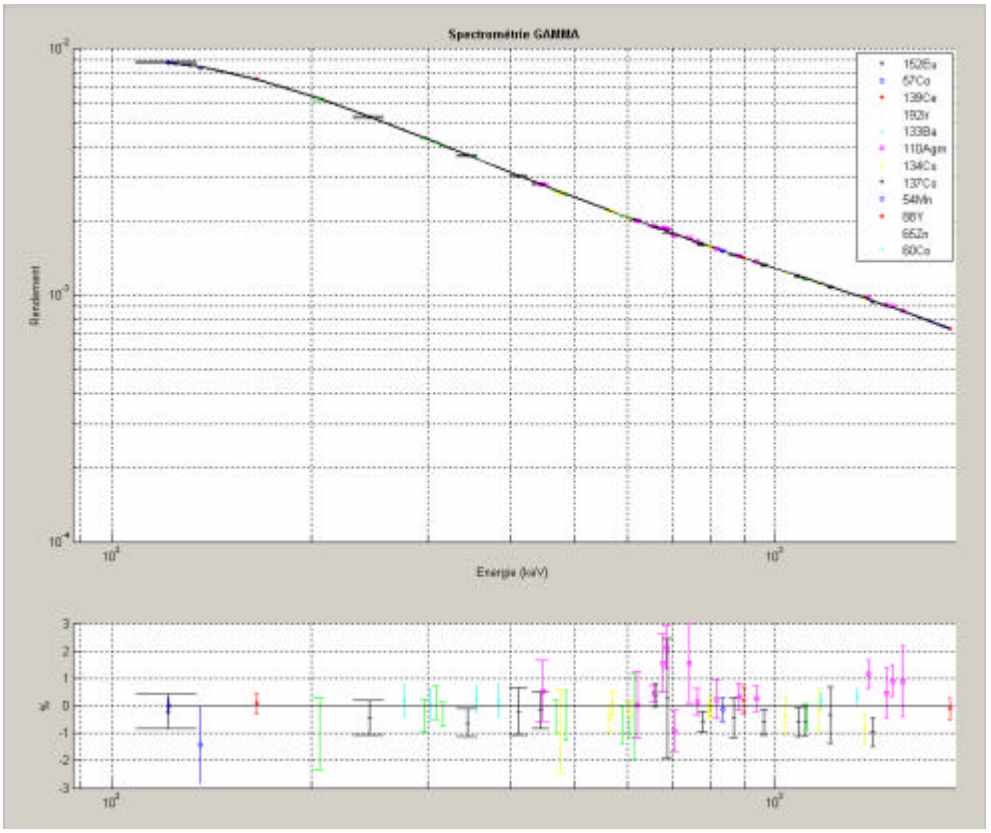
Choix « *Xlog / Ylog* »

Après avoir coché le choix *Xlog* et/ou *Ylog*, les axes des abscisses et ordonnées sont affichés sur les zones de tracés en échelle logarithmique.

L'axe des ordonnées de la courbe des résidus n'est jamais affiché en échelle logarithmique.

La fonction log est dévalidée en décochant le choix *Xlog* et/ou *Ylog*.

Un exemple de la zone de tracé après zoom est présenté ci-dessous :



Choix « *Edition* »

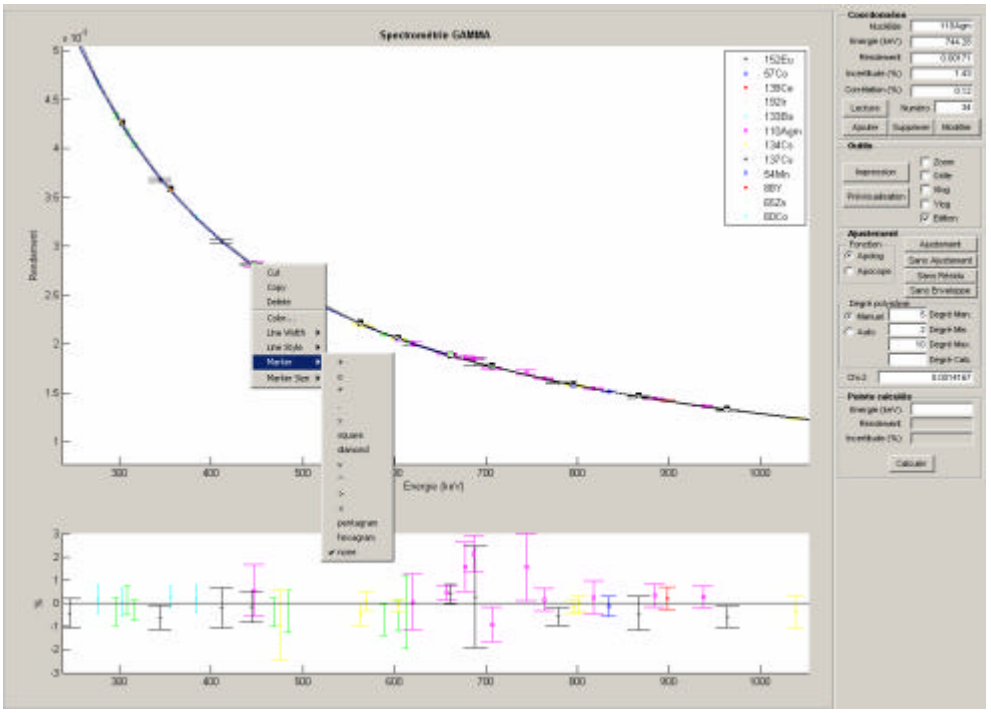
Après avoir coché le choix *Edition*, l'utilisateur peut manipuler, déplacer et modifier les objets graphiques présents dans les zones de tracés. Les propriétés de ces objets sont également modifiables, en utilisant les popup-menus qui sont devenus accessibles par clic droit sur les objets.

Les objets modifiables de la zone de tracé sont par exemple :

- titres des graphiques,
- noms des axes,
- propriétés des points tracés sur les courbes (couleur, forme, …)
- légendes des courbes,
- position des objets sur la zone de tracé.

La fonction édition est dévalidée en décochant le choix *Edition*.

L'exemple ci-dessous montre un exemple de popup menus apparaissant après sélection du choix *Edition* et sélection du nuage de points :



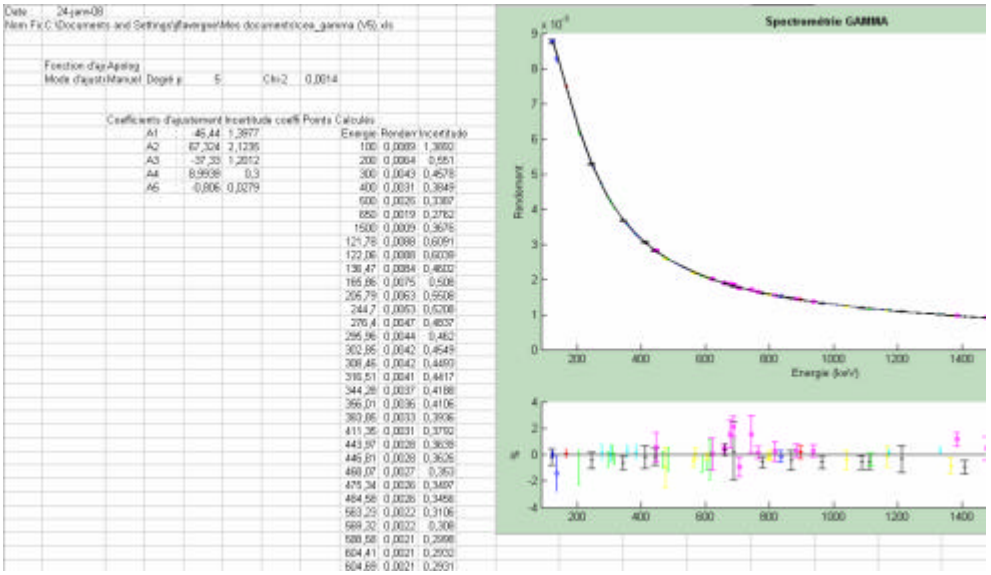
5.4.2 Outils d'impression

Bouton « *Impression* »

Après action sur le bouton *Impression*, l'application lance l'impression des zones de tracés. La sortie impression est effectuée sur l'imprimante définie par défaut dans Windows.

Bouton « *Image vers Excel* »

Après action sur le bouton *Image vers Excel*, l'application insère l'image au format BMP de la zone de tracés dans la feuille « Feuil2 » du fichier Excel de sortie. Ci-dessous est présenté un exemple de la feuille Excel après action sur ce bouton :



.

5.5 Utilisation des données d'entrée

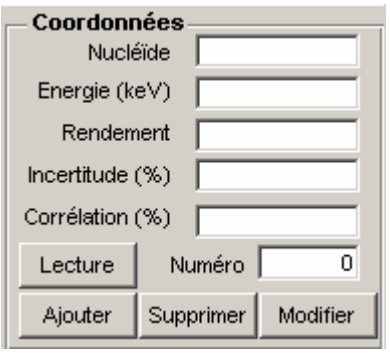
Les données d'entrée pour effectuer les traitements sont obtenus dans le fichier Excel d'entrée, comme vu au paragraphe §5.2.

Une fois l'application lancée, ces données peuvent être modifiées par l'utilisateur avant d'appliquer de nouveau les traitements.

De même l'application peut effectuer les calculs d'ajustement correspondant à de nouvelles valeurs d'énergie saisies par l'utilisateur.

5.5.1 Modifications des données d'entrée

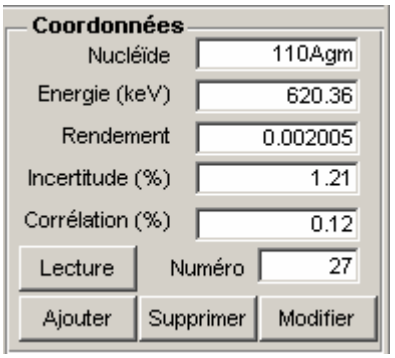
Une fois l'application lancée et après affichage des zones de tracés, l'utilisateur peut travailler les points de tracé en utilisant le groupe d'objets « *Coordonnées* » sur la droite de l'écran.



Lorsque l'utilisateur sélectionne un des points de la courbe de tracé (sélection par simple clic sur le point de la courbe), les champs d'information de la boîte *Coordonnées* sont renseignés avec les données correspondant au point, à savoir :

- *Nucléide* : nom du nucléide,
- *Energie* : énergie du point sélectionné,
- *Rendement* : énergie du point sélectionné,
- *Incertitude* : Incertitude du point sélectionné,
- *Corrélation* : corrélation du point sélectionné.
- *Numéro* : numéro d'ordre du point sélectionné dans la liste de l'ensemble des points.

Après sélection d'un point, la boîte *Coordonnées* apparaît de la façon suivante :

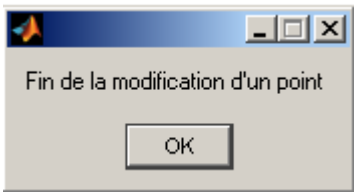


Une ou plusieurs données des zones de saisie peuvent être modifées.

Bouton « *Modifier* »

Une action sur le bouton *Modifier* met à jour les données du point correspondant au numéro d'ordre du point.

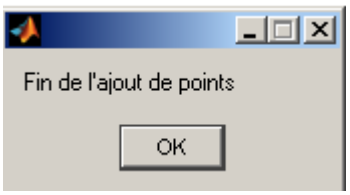
En fin de modification du point, le message suivant apparaît :



Bouton « *Ajouter* »

Une action sur le bouton *Ajouter* ajoute un nouveau point dont les coordonnées sont les données affichées dans la zone de saisie. La liste des points pris en compte par les traitements est incrémentée de un point.

En fin d'ajout du point, le message suivant apparaît :



Bouton « *Supprimer* »

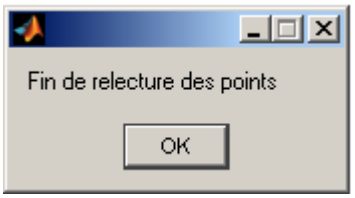
Une action sur le bouton *Supprimer* supprime le point sélectionné de la liste des points à prendre en compte dans les traitements.

En fin de suppression du point, le message suivant apparaît :

Bouton « *Lecture* »

Une action sur le bouton *Lecture* effectue une relecture complète des données valides contenues dans le fichier d'entrée. La liste des points à prendre en compte par les traitements correspond donc aux points du fichier d'entrée.

En fin de lecture des points, le message suivant apparaît :



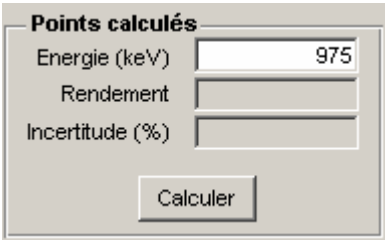
Remarque A chaque ajout, modification, suppression de points, ou relecture du fichier de données d'entrée, les calculs du polynôme d'ajustement sont mis à jour. Les tracés sont également mis à jour dans la zone de tracé.

5.5.2 Ajout de points calculés

A chaque fois que les calculs du polynôme d'ajustement sont effectués, l'application calcule les points correspondant à la liste des points à calculer présentés dans l'onglet « Feuil2 » du fichier d'entrée.

En plus de ces points l'utilisateur peut ajouter manuellement des points sur lesquels il faut appliquer le polynôme d'ajustement.

La saisie de ces nouveaux points est effectuée avec la boîte de dialogue *Points Calculés* :

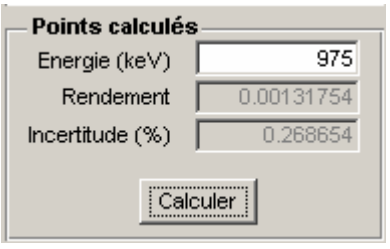


L'utilisateur doit saisir l'énergie du point à calculer dans la zone de saisie *Energie (keV)*

L'utilisateur lance le calcul de ce nouveau point par action sur le bouton *Calculer*.

Les zones d'information *Rendement* et *Incertitude (%)* sont renseignés avec les valeurs calculées.

Les nouveaux points calculés s'ajoutent à la liste des points calculés.



5.6 Quitter l'application

Une fois les traitements et la visualisation des tracés terminés, l'utilisateur peut quitter l'application de 2 manières différentes :

- par le menu de l'application « File -> Close »,
- par clic de souris sur l'icône en haut à droite sur la fenêtre de l'application.

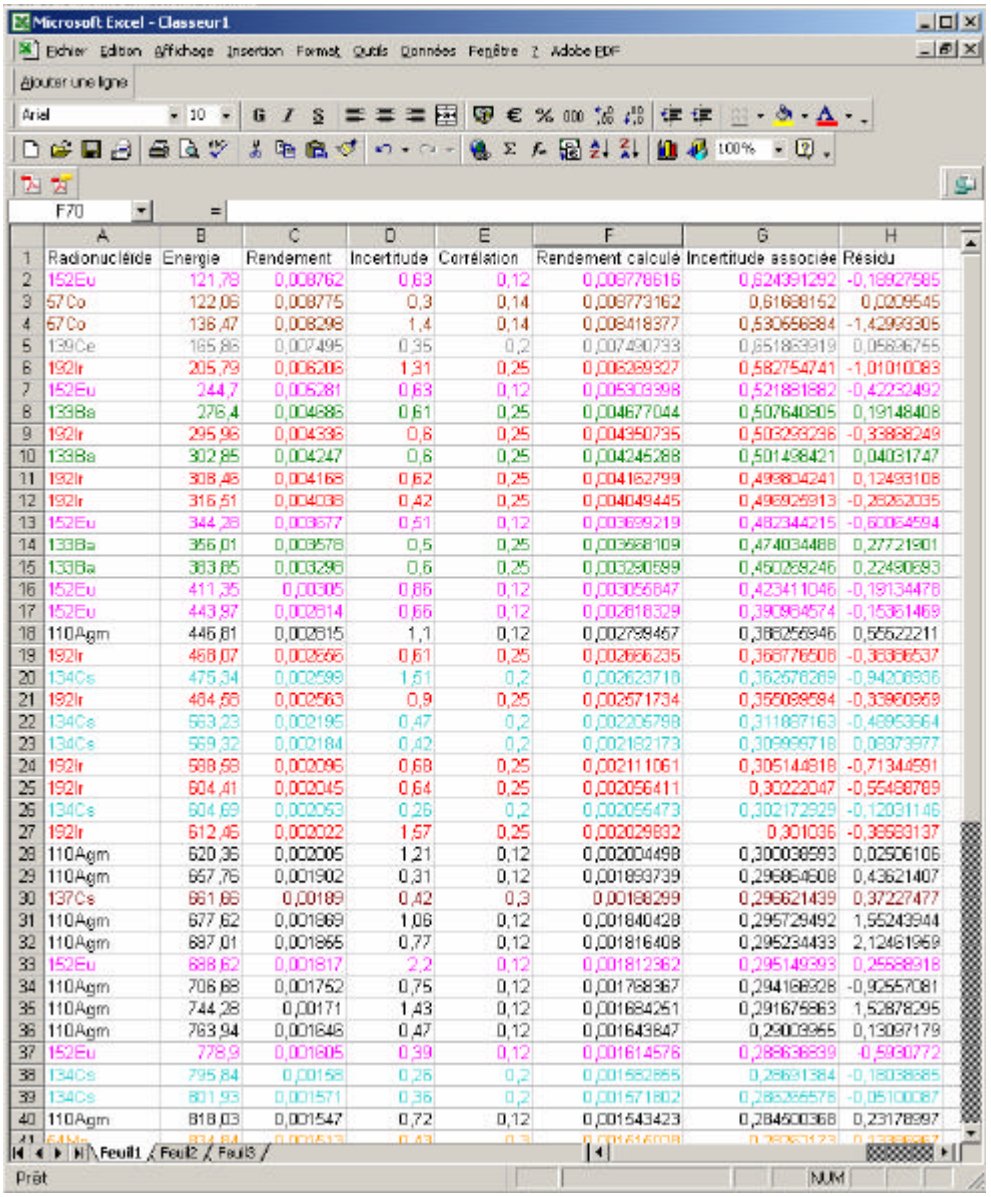
Lorsque l'application se ferme, les opérations suivantes sont effectuées :

- fermeture de la fenêtre de visualisation,
- fermeture du fichier Excel d'entrée. Ce fichier doit être fermé sans être enregistré, car les données du fichier d'entrée ne doivent pas être modifiées.
- fermeture du fichier Excel de sortie en enregistrant les données.

Enregistrement du fichier de sortie.

A la fermeture de l'application, les onglets « Feuil1 » et « Feuil2 » du fichier de sortie sont renseignés avec les données et résultats de calcul.

Constitution de l' Onglet « Feuil1 »



	A	B	C	D	E	F	G	H
1	Radionucléide	Energie	Rendement	Incertitude	Corrélation	Rendement calculé	Incertitude associée	Résidu
2	152Eu	121,78	0,008762	0,63	0,12	0,008778616	0,824391292	-0,16927585
3	57Co	122,06	0,008775	0,3	0,14	0,008773162	0,61688152	0,0209545
4	57Co	136,47	0,008298	1,4	0,14	0,008418377	0,530666884	-1,42993305
5	139Ce	165,86	0,007495	0,35	0,2	0,007490733	0,651883919	0,05836765
6	192Ir	205,79	0,006206	1,31	0,25	0,006369327	0,582754741	-1,01010083
7	152Eu	244,7	0,006281	0,63	0,12	0,005903998	0,521881882	-0,42232492
8	133Ba	276,4	0,004686	0,61	0,25	0,004677044	0,507640805	0,19148408
9	192Ir	295,96	0,004336	0,6	0,25	0,004350735	0,503293236	-0,33888249
10	133Ba	302,85	0,004247	0,6	0,25	0,004245288	0,501498421	0,04031747
11	192Ir	308,46	0,004168	0,62	0,25	0,004162799	0,499804241	0,12493108
12	192Ir	316,51	0,004038	0,42	0,25	0,004049445	0,496926913	-0,26262035
13	152Eu	344,28	0,003677	0,51	0,12	0,003699219	0,482344215	-0,60064594
14	133Ba	356,01	0,003578	0,5	0,25	0,003588109	0,474034488	0,27721901
15	133Ba	383,85	0,003296	0,6	0,25	0,003290589	0,460269246	0,22490693
16	152Eu	411,35	0,00305	0,66	0,12	0,003056647	0,42341046	-0,19134478
17	152Eu	443,97	0,002814	0,66	0,12	0,002818329	0,390964574	-0,15361469
18	110Agm	446,81	0,002815	1,1	0,12	0,002798467	0,386256946	0,55522211
19	192Ir	468,07	0,002666	0,61	0,25	0,002686235	0,368776508	-0,36366537
20	134Cs	475,34	0,002599	1,51	0,2	0,002623718	0,362576269	-0,94208936
21	192Ir	484,56	0,002563	0,9	0,25	0,002571734	0,355089584	-0,33960969
22	134Cs	563,23	0,002195	0,47	0,2	0,002205798	0,311897163	-0,48953664
23	134Cs	569,32	0,002184	0,42	0,2	0,002192173	0,309999718	0,09373977
24	192Ir	588,58	0,002096	0,68	0,25	0,002111061	0,305144818	-0,71344591
25	192Ir	604,41	0,002045	0,64	0,25	0,002056411	0,30222047	-0,55488789
26	134Cs	604,69	0,002053	0,26	0,2	0,002055473	0,302172929	-0,12031146
27	192Ir	612,46	0,002022	1,57	0,25	0,002029832	0,301036	-0,38583137
28	110Agm	620,36	0,002005	1,21	0,12	0,002004498	0,300038593	0,02506106
29	110Agm	657,76	0,001902	0,31	0,12	0,001893739	0,296864608	0,43621407
30	137Cs	661,66	0,00189	0,42	0,3	0,00188299	0,296621439	0,37227477
31	110Agm	677,62	0,001869	1,06	0,12	0,001840428	0,295729492	1,55243944
32	110Agm	687,01	0,001865	0,77	0,12	0,001816408	0,295234433	2,12461969
33	152Eu	688,62	0,001817	2,2	0,12	0,001812362	0,295149393	0,25588918
34	110Agm	706,68	0,001752	0,75	0,12	0,001768367	0,294186928	-0,92557081
35	110Agm	744,28	0,00171	1,43	0,12	0,001684251	0,291675863	1,52878295
36	110Agm	763,94	0,001648	0,47	0,12	0,001643847	0,29009965	0,13097179
37	152Eu	778,9	0,001605	0,39	0,12	0,001614576	0,288636839	-0,5930772
38	134Cs	795,84	0,00158	0,26	0,2	0,001582865	0,28631384	-0,18038685
39	134Cs	801,93	0,001571	0,36	0,2	0,001571802	0,285266578	-0,05100087
40	110Agm	818,03	0,001547	0,72	0,12	0,001543423	0,284600368	0,23178397

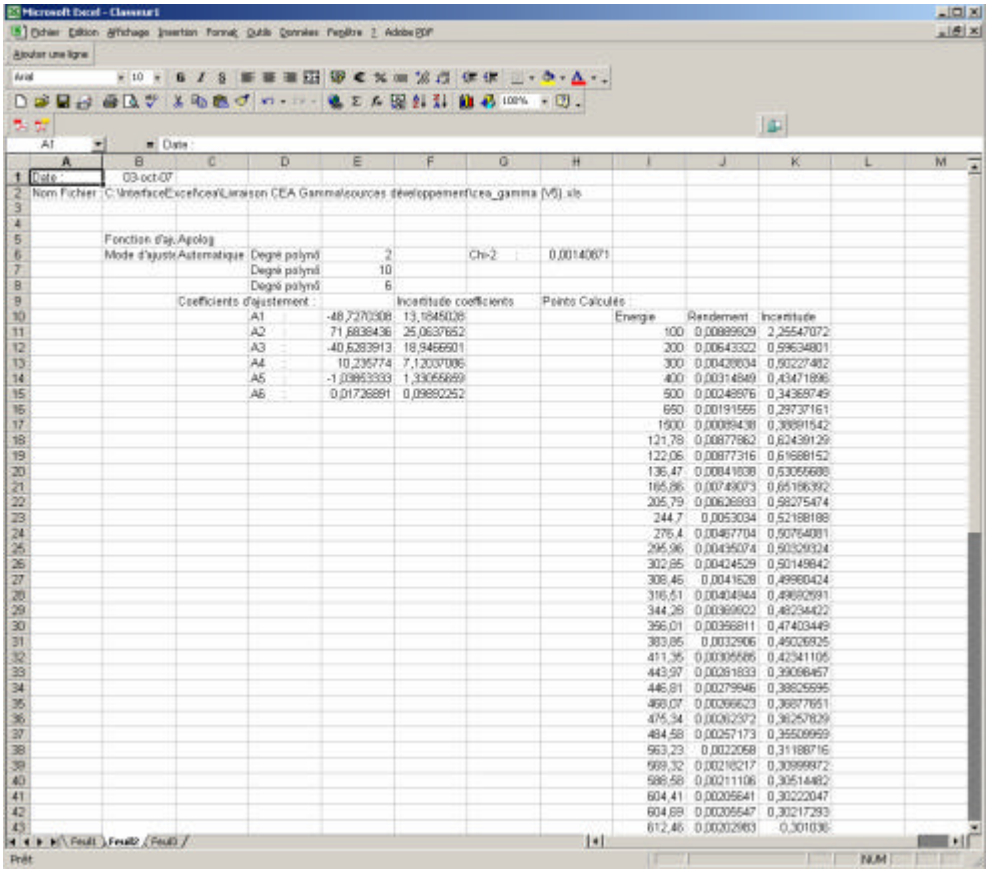
L'onglet « Feuil1 » du fichier possède obligatoirement une première ligne qui représente l'entête du fichier. Cette entête est constituée des informations suivantes :

- Colonne 1 : « Radionucléide »
- Colonne 2 : « Energie »
- Colonne 3 : « Rendement »
- Colonne 4 : « Incertitude »
- Colonne 5 : « Corrélation »
- Colonne 6 : « Rendement calculé ».
- Colonne 7 : « Incertitude associée ».
- Colonne 8 : « Résidu ».

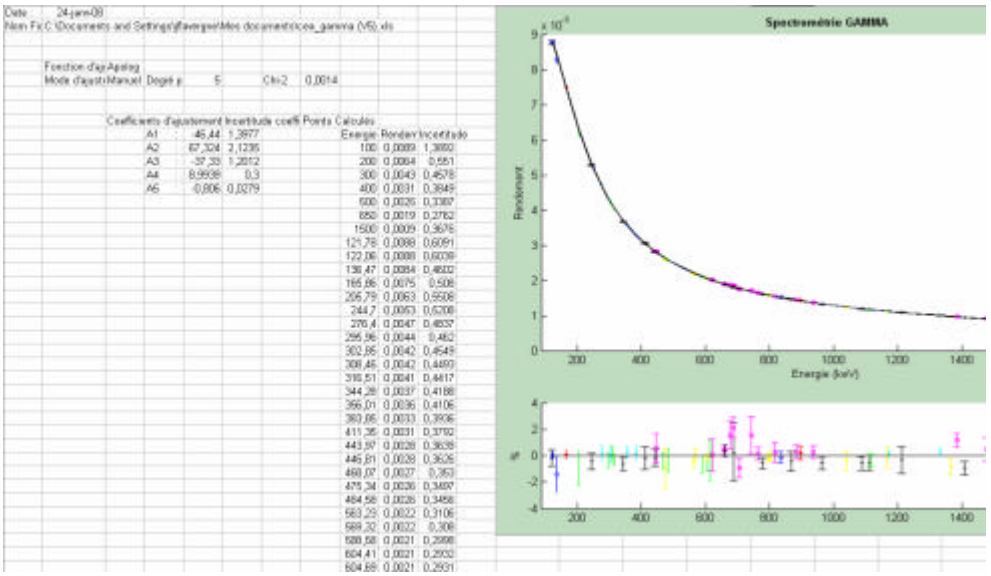
Les données sauvegardées correspondent à toutes les données utilisées pour calculer le polynôme d'ajustement et se situent sur les lignes suivant l'entête sur l'onglet « Feuil1 ». Ces données représentent les informations suivantes :

- Colonne 1 : Nom = Nom du radionucléide correspondant aux données de la ligne,
- Colonne 2 : E = Energie du radionucléide correspondant aux données de la ligne,
- Colonne 3 : R = Rendement du radionucléide correspondant aux données de la ligne,
- Colonne 4: I = Incertitude de mesure du radionucléide correspondant aux données de la ligne,
- Colonne 5: C = corrélation de mesure du radionucléide correspondant aux données de la ligne,
- Colonne 6: RC = rendement calculé obtenu avec la formule du polynôme d'ajustement correspondant aux données de la ligne,
- Colonne 7 : IA = incertitude associée au rendement calculé aux données de la ligne,
- Colonne 8 : RES = résidu obtenu avec la formule du polynôme d'ajustement aux données de la ligne,

Constitution de l' Onglet « Feuil2 »



Un autre exemple de la feuille « Feuil2 » est donné ci-dessous avec l'image de la zone de traitement intégrée sur la feuille :



L'onglet « *Feuil2* » est renseigné avec l'ensemble des paramètres utilisés pour le calcul du polynôme d'ajustement et avec les résultats de calcul obtenus. La liste de ces informations est la suivante :

- Date : date à laquelle le traitement a été effectué,
- Nom Fichier : nom du fichier d'entrée correspondant aux données d'entrée,
- Fonction d'ajustement utilisée : Apolog ou Apocope
- Mode d'ajustement utilisé : Automatique ou Manuel
- En mode Automatique : degré du polynôme minimum et degré du polynôme maximum, degré du polynôme calculé
- En mode Manuel : degré du polynôme calculé
- Chi-2 : valeur du Chi-2 calculée avec la fonction d'ajustement obtenue
- Coefficients d'ajustement et incertitude des coefficients pour tous les degrés du polynôme d'ajustement obtenu.
- Valeurs des énergie, rendement et incertitude pour tous les points calculés (points à calculer du fichier d'entrée et points à calculer saisis par l'utilisateur)

A la fermeture du fichier Excel de sortie, l'application présente une boîte de dialogue permettant de choisir le nom du fichier de sortie et le chemin de sauvegarde de ce fichier